

Corso di Studio in
SCIENZE DELLE ATTIVITÀ MOTORIE E SPORTIVE

Insegnamento:
CHIMICA, BIOCHIMICA E FISICA APPLICATA ALLE SCIENZE
MOTORIE

Modulo di Insegnamento: CHIMICA E BIOCHIMICA

Dott.ssa **Claudia Rossi**

Dipartimento di Scienze Psicologiche, della Salute e del Territorio (DiSPuTer)
Laboratorio di Biochimica Analitica e Proteomica
Centro di Studi e Tecnologie Avanzate CAST
Università degli Studi "G. d'Annunzio"
Tel. 0871 541596 – 0871 541333

claudia.rossi@unich.it

1

Modulo: Chimica e Biochimica → Programma del Corso

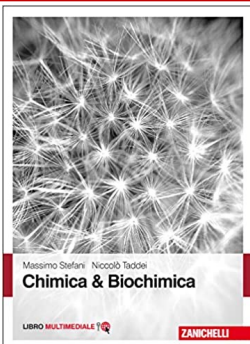
Contenuti

MODULO DI CHIMICA: Elementi di chimica generale. Principali contenuti: equilibri in soluzione, reazioni redox, proprietà colligative ed elementi di base di chimica del carbonio
 MODULO DI BIOCHIMICA: Le biomolecole. Metabolismi di base di glucidi, lipidi e proteine. Caratteristiche principali dei metabolismi energetici

Testi di riferimento

MODULO DI CHIMICA:
 Massimo Stefani, Niccolò Taddei, Chimica & Biochimica (Zanichelli)
 MODULO DI BIOCHIMICA:
 David L. Nelson, Michael M. Cox Introduzione alla biochimica di Lehninger (Zanichelli)
 Antonio Di Giulio, Amelia Fiorilli, Claudio Stefanelli, Biochimica per Scienze motorie (Casa Editrice Ambrosiana. Distribuzione Zanichelli)

Massimo Stefani, Niccolò Taddei
Chimica & Biochimica
 2017



David L. Nelson, Michael M. Cox
Introduzione alla biochimica di Lehninger
 Sesta edizione
 a cura di Gianfranco
 Trad. di A. De Donatis, R. Sifanese
 2018



Antonio Di Giulio, Amelia Fiorilli, Claudio Stefanelli
Biochimica per Scienze motorie
 Casa Editrice Ambrosiana. Distribuzione esclusiva Zanichelli
 2011



2

Modulo: Chimica e Biochimica → Programma del Corso

Programma esteso

MODULO DI CHIMICA: Struttura dell'atomo, proprietà degli elementi, tavola periodica. Legami chimici, classificazione dei composti e formule chimiche. Proprietà delle soluzioni: elettroliti non elettroliti. Stechiometria. Concentrazioni. Reazioni reversibili e irreversibili. Esercizi. Legge di azione di massa, prodotto ionico dell'acqua, definizione di pH. Acidi e basi, forti e deboli, e calcolo del pH. Idrolisi salina e effetti sul pH. Esercizi. Definizione e ruolo dei tamponi. Numero di ossidazione e reazioni redox. Proprietà colligative. Osmosi. Elementi di chimica del carbonio: idrocarburi e ibridazione del carbonio, gruppi funzionali con particolare riferimento alle funzioni semplici e complesse dell'ossigeno. Reattività degli alcoli, carbonili, e carbossili. Gli alfa e beta chetoacidi, alfa e beta ossiacidi. La reazione di riduzione dell'acido piruvico ad acido lattico. Legame glicosidico, legame peptidico, legame estere e anidridi.

MODULO DI BIOCHIMICA: Le biomolecole: struttura e classificazione di glucidi, lipidi e proteine. Struttura e funzione dell'emoglobina e mioglobina. Classificazione e funzione delle vitamine. La variazione dell'energia libera DG e ruolo dell'ATP. Il sistema della creatina-fosfocreatina muscolare e suo ruolo nella sintesi veloce di ATP. Enzimi: definizione, classificazione, cinetica enzimatica allo stato stazionario e inibitori reversibili competitivi e non competitivi. Catabolismo dei glucidi: glicolisi, formazione dell'acido lattico, via dei pentosi e ciclo di Krebs. Catabolismo dei lipidi: corpi chetonici e beta ossidazione. Catabolismo delle proteine: proteasi, transdeaminazione, glutammina, ciclo dell'alanina e ciclo urea. Fosforilazione ossidativa e sintesi dell'ATP. Elementi dell'anabolismo dei glucidi, lipidi e proteine. Gluconeogenesi, glicogenosintesi e ciclo di Cori. Adattamenti del metabolismo glucidico, lipidico e proteico all'attività motoria aerobica ed anaerobica.

3

Modulo: Chimica e Biochimica → Programma del Corso

CHIMICA

Programma esteso

MODULO DI CHIMICA: Struttura dell'atomo, proprietà degli elementi, tavola periodica. Legami chimici, classificazione dei composti e formule chimiche. Proprietà delle soluzioni: elettroliti non elettroliti. Stechiometria. Concentrazioni. Reazioni reversibili e irreversibili. Esercizi. Legge di azione di massa, prodotto ionico dell'acqua, definizione di pH. Acidi e basi, forti e deboli, e calcolo del pH. Idrolisi salina e effetti sul pH. Esercizi. Definizione e ruolo dei tamponi. Numero di ossidazione e reazioni redox. Proprietà colligative. Osmosi. Elementi di chimica del carbonio: idrocarburi e ibridazione del carbonio, gruppi funzionali con particolare riferimento alle funzioni semplici e complesse dell'ossigeno. Reattività degli alcoli, carbonili, e carbossili. Gli alfa e beta chetoacidi, alfa e beta ossiacidi. La reazione di riduzione dell'acido piruvico ad acido lattico. Legame glicosidico, legame peptidico, legame estere e anidridi.

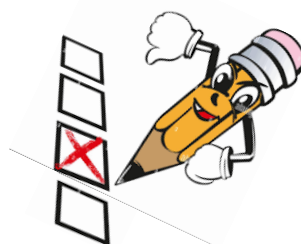
Prerequisiti

Conoscenza degli strumenti matematici e fisici di base necessari per la comprensione di contenuti scientifici più specifici in ambito chimico e biochimico.

4

Modulo: Chimica e Biochimica → **Modalità di verifica dell'apprendimento**

CHIMICA E BIOCHIMICA



Esame scritto in modalità di domande a risposta multipla esclusivamente sul programma teorico svolto a lezione. Saranno presentate 15 domande a schermo per ciascuna delle quali sono proposte 4 risposte possibili di cui una sola è corretta. Ogni risposta corretta è valutata 1 punto, ogni risposta sbagliata è valutata -0.2 punti, ogni risposta non data non viene valutata. L'esame è superato se si ottiene un punteggio totale superiore a 9 punti.

5

CHIMICA

- **La scienza che studia la composizione, la struttura e le trasformazioni della materia.**
- **Scienza che si occupa della composizione, della struttura e della reattività delle sostanze e delle reazioni attraverso le quali una sostanza si trasforma in un'altra.**

6

La struttura dell'atomo

1. La teoria Atomica
2. Numero atomico e numero di massa
3. Isotopi
4. La teoria di Bohr e la chimica quantistica
5. Configurazione elettronica degli atomi

7

La teoria atomica

Nell'Ottocento si appurò che la materia era costituita da parti piccolissime, formate da atomi.

Un **atomo** è la parte più piccola di un elemento che conserva tutte le proprietà chimiche dell'elemento stesso.



ALCUNE PROPRIETÀ DELL'ATOMO

- Dimensioni:
 $1/100.000.000 (10^{-8})$ cm
- Massa:
1gr di atomi di Idrogeno (H) contiene $\approx 600.000.000.000.000.000.000.000 (6 \times 10^{23})$ atomi

8

La teoria atomica

La **teoria atomica di Dalton** si articola in quattro punti:

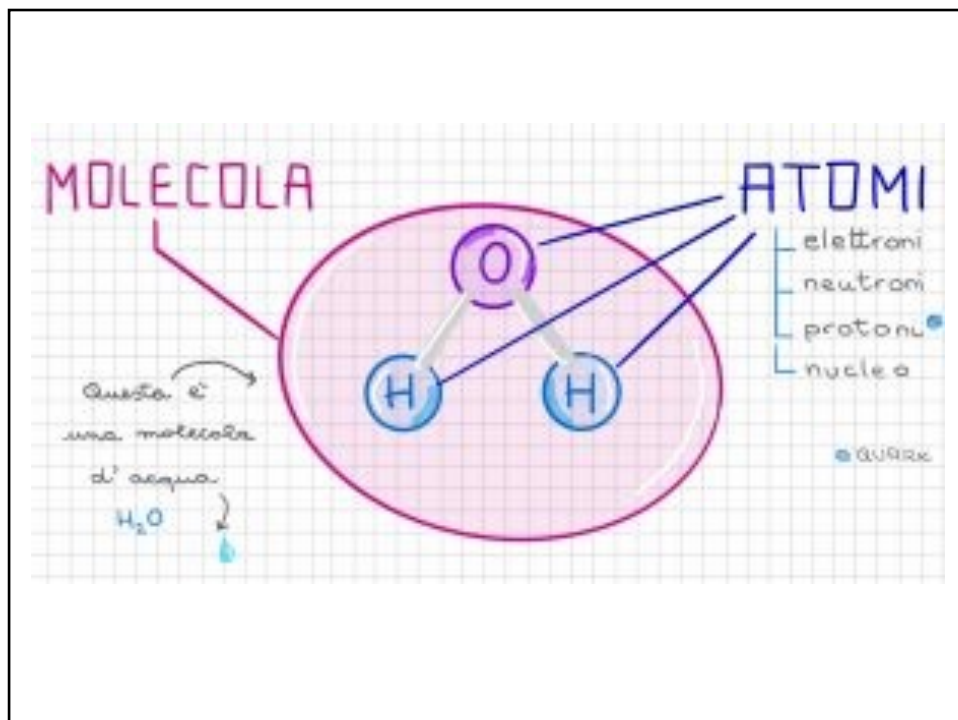
- la materia è costituita da atomi, particelle di materia indivisibili e indistruttibili;
- un elemento chimico è formato da atomi tutti uguali tra loro;
- elementi diversi sono formati da atomi diversi per volume, massa e proprietà;
- atomi diversi possono unirsi tra loro per formare i composti chimici.

Atomo secondo John Dalton, 1808:

Particella di forma sferica solida ed indivisibile



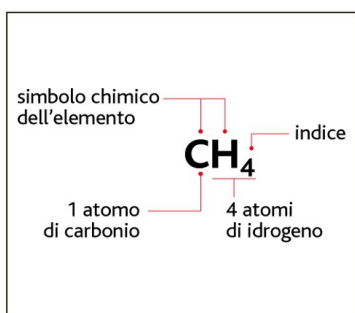
9



10

La formula chimica

La **formula chimica** di una molecola indica la composizione qualitativa e quantitativa della molecola, utilizzando i simboli chimici degli elementi che ne fanno parte.



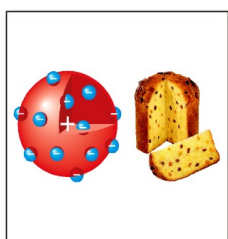
Le **formule molecolari** indicano quali e quanti atomi sono presenti nella molecola. Sono formate da:

- i simboli chimici degli elementi presenti;
- gli indici, i numeri interi, scritti come pedice dopo il simbolo chimico, che indicano il numero di atomi presenti;

11

La teoria Atomica: le particelle subatomiche

Nel 1904 J.J. Thomson propose un modello di atomo in cui si faceva riferimento a **particelle subatomiche**.



- Gli atomi di tutti gli elementi sono formati da tre particelle fondamentali

The Sub-atomic Particles			
Size	Name	Mass (Kg)	Charge (C)
	Proton	1.67×10^{-27}	$+1.602 \times 10^{-19}$
	Neutron	1.67×10^{-27}	0
 • size exaggerated	Electron	9.11×10^{-31}	-1.602×10^{-19}

Thomson propose un modello di atomo costituito da una massa carica positivamente uniformemente distribuita, all'interno della quale erano presenti gli elettroni, carichi negativamente, in numero tale da determinare l'equilibrio delle cariche e quindi la neutralità.

12

La teoria Atomica: le particelle subatomiche, particelle fondamentali dell'atomo

L'atomo non è indivisibile, come aveva sostenuto Dalton, ma è costituito da particelle più piccole, dette **subatomiche**.

Particella	Carica elettrica	Carica relativa al protone	Massa (kg)
elettrone (e)	$-1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	-1	$9,109 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
protone (p)	$1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$	+1	$1,673 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
neutrone (n)	0	0	$1,675 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$

13

Le particelle subatomiche

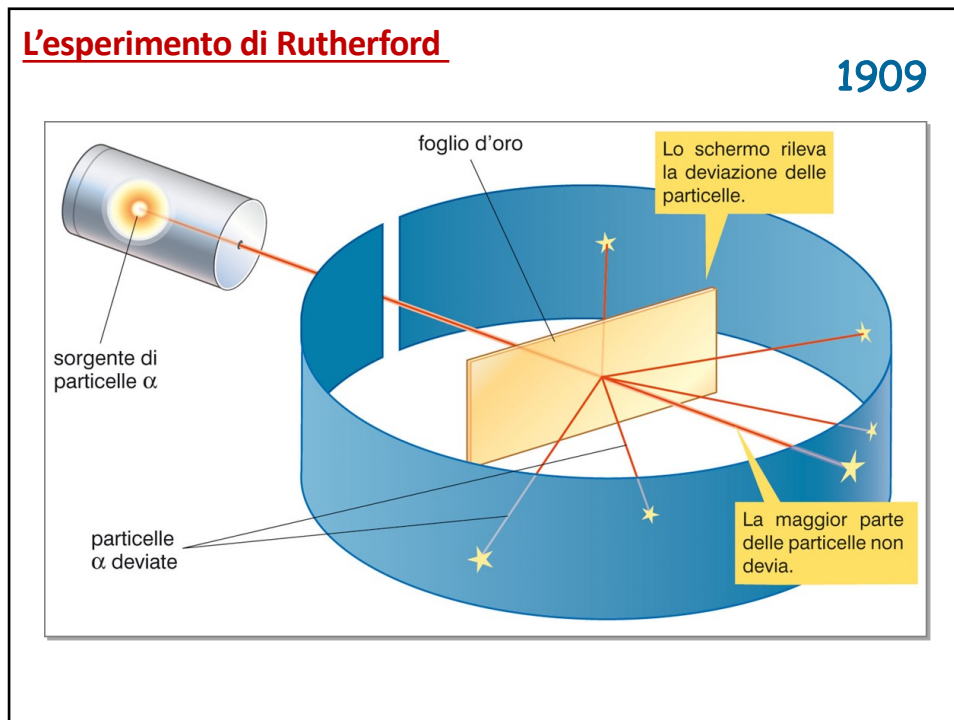
Gli atomi di tutti gli elementi sono formati da tre particelle fondamentali

- **elettrone**: carica negativa,
- **protone**: carica positiva,
- **neutrone**: priva di carica elettrica massa poco superiore a quella del protone.

Particella	Simbolo	Carica	Massa approssimativa (Peso in uma)*	Posizione nell'atomo
Protone	p oppure p+	+1	1	Nel nucleo
Elettrone	e oppure e-	-1	1/1837	Fuori del nucleo
Neutrone	n oppure n0	0	1	Nel nucleo

*uma: unità di misura della massa atomica
1uma corrisponde approssimativamente al peso del protone o del neutrone

14



15

L'esperimento di Rutherford

Diagram illustrating the transition from Thomson's model to Rutherford's model:

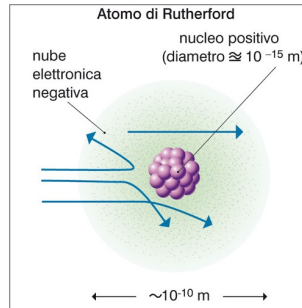
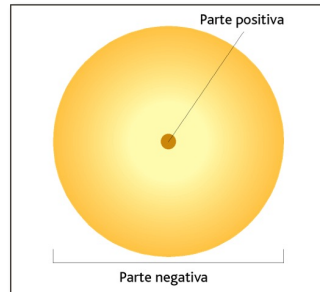
- atomo di Thomson**: Thomson's model, showing a uniform positive charge (nube elettronica positiva) with embedded electrons.
- Atomo di Rutherford**: Rutherford's model, showing a central positive nucleus (nucleo positivo) surrounded by a negative electron cloud (nube elettronica negativa). The nucleus diameter is approximately 10^{-15} m.

Sulla base dei risultati sperimentali Rutherford propose un nuovo modello di atomo: un modello planetario:

- La massa dell'atomo non è distribuita uniformemente (come sosteneva Thomson), ma è concentrata in una piccola zona, il nucleo, carico positivamente; infatti
- gli elettroni, leggerissimi, occupano lo spazio vuoto intorno al nucleo e vi ruotano intorno come pianeti;
- il numero di elettroni è tale da bilanciare la carica positiva del nucleo.

16

L'esperimento di Rutherford



- Sulla base dei risultati sperimentali Rutherford propose un nuovo modello di atomo
- l'atomo è composto da un nucleo in cui sono concentrate carica positiva e massa;
- gli elettroni occupano lo spazio vuoto intorno al nucleo e vi ruotano intorno come pianeti;
- il numero di elettroni è tale da bilanciare la carica positiva del nucleo.

17

Il neutrone James Chadwick (1932)



Particelle neutre costituenti il nucleo insieme ai protoni.

Massa neutrone leggermente superiore massa protone

Particella	Massa (kg)	Carica elettrica (C)
protone	$1.672 \cdot 10^{-27}$	$1.60 \cdot 10^{-19}$
neutrone	$1.675 \cdot 10^{-27}$	0
elettrone	$9.11 \cdot 10^{-31}$	$-1.60 \cdot 10^{-19}$

18

Numero atomico e numero di massa

Il numero dei protoni di un atomo si chiama **numero atomico Z**:

Elemento	Z	= Numero protoni	= Numero elettroni
H (idrogeno)	1	= 1	= 1
O (ossigeno)	8	= 8	= 8
Cl (cloro)	17	= 17	= 17

Il numero di protoni di un atomo è uguale al numero di elettroni.

Il numero totale dei protoni e dei neutroni è chiamato **numero di massa A**:

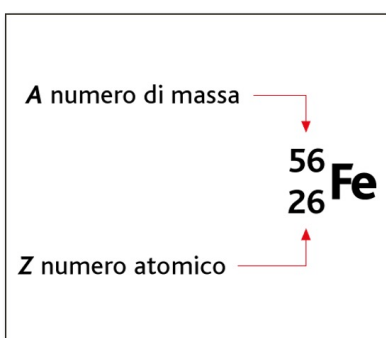
Elemento	A	= Z	+ Numero neutroni
O (ossigeno)	16	= 8	+ 8
F (fluoro)	19	= 9	+ 10
Au (oro)	197	= 79	+ 118

Il numero di massa A di un atomo si ottiene sommando il numero di protoni al numero atomico.

19

Numero atomico e numero di massa

Un elemento chimico è formato da atomi con lo stesso numero di protoni, cioè con lo stesso numero atomico.



Ogni elemento è rappresentato con un **simbolo chimico**:

- il simbolo chimico di un elemento è costituito dalla lettera iniziale del nome latino dell'elemento scritta in stampatello maiuscolo;
- il numero di massa A di un atomo si scrive prima del simbolo in alto, il numero atomico Z in basso.

$$A - Z = \text{numero di neutroni}$$

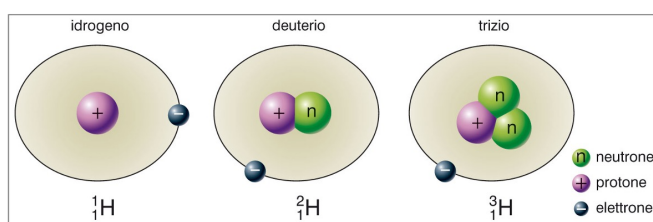
20

Gli Isotopi

isotopo, dal greco ἴσος = stesso e τόπος = posto

Atomi che hanno lo stesso numero di protoni, ma differente numero di neutroni sono detti **isotopi**.

^1_1H , ^2_1H , ^3_1H
$^{38}_{19}\text{K}$, $^{39}_{19}\text{K}$, $^{40}_{19}\text{K}$, $^{41}_{19}\text{K}$, $^{42}_{19}\text{K}$, $^{43}_{19}\text{K}$
$^{39}_{20}\text{Ca}$, $^{40}_{20}\text{Ca}$, $^{41}_{20}\text{Ca}$, $^{42}_{20}\text{Ca}$, $^{43}_{20}\text{Ca}$, $^{44}_{20}\text{Ca}$, $^{45}_{20}\text{Ca}$, $^{46}_{20}\text{Ca}$, $^{47}_{20}\text{Ca}$, $^{48}_{20}\text{Ca}$, $^{49}_{20}\text{Ca}$



Gli **ISOTOPI** sono atomi dello stesso elemento aventi le stesse proprietà chimiche ma masse diverse perché contengono un diverso numero di neutroni.

21

Unità di massa atomica (u)

La massa di un atomo o di una particella subatomica è molto piccola, ed esprimerla in grammi non è pratico.

Si è individuato un atomo di riferimento, l'isotopo 12 del carbonio (^{12}C), e si è definita come unità di massa atomica (**u**) 1/12 della massa di tale isotopo.

22

La massa atomica relativa o peso atomico

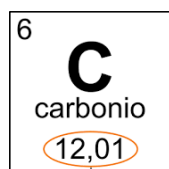
La **massa atomica relativa**, **MA**, di un elemento è la sua massa espressa in unità u, quindi relativamente alla massa dell'atomo di carbonio.

La tavola periodica riporta per ogni elemento il valore della massa atomica, chiamata anche **peso atomico**.

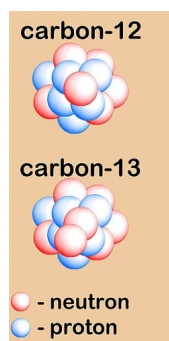
La **massa atomica relativa** (o **peso atomico**) che leggiamo sulla tavola periodica è una media pesata che tiene conto della distribuzione naturale dei diversi isotopi di quell'elemento. La **MA** di qualsiasi elemento è il rapporto fra la massa di un atomo di quell'elemento e la dodicesima parte (1/12) della massa dell'isotopo ^{12}C del carbonio, ossia l'unità di massa atomica (u). **MA = (massa di 1 atomo in gr)/u**

23

Calcolo peso atomico del Carbonio



Peso atomico
carbonio



$$\begin{aligned} \text{carbon - 12} &\rightarrow 99\% \\ \text{carbon - 13} &\rightarrow 1\% \\ &= (12 \times 0.99) + (13 \times 0.01) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{carbon - 12} &\rightarrow 99\% \\ \text{carbon - 13} &\rightarrow 1\% \\ &= (12 \times 0.99) + (13 \times 0.01) \\ &= 11.88 + 0.13 \end{aligned}$$

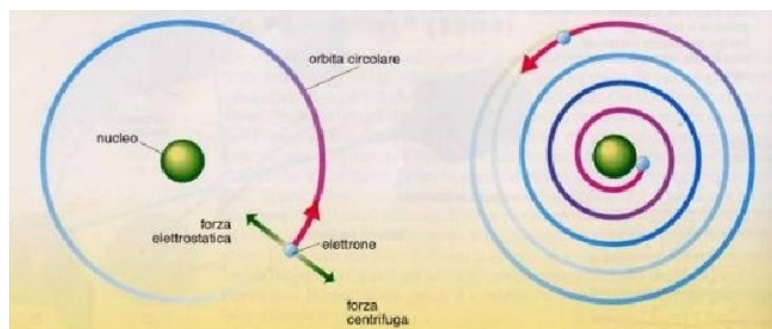
$$\text{Atomic Weight} = 12.01$$

24

La teoria di Bohr e la chimica quantistica

Limite modello atomico di Rutherford:

- Gli elettroni che ruotano intorno al nucleo dovrebbero perdere energia cinetica sotto forma di emissione di radiazione elettromagnetica, come previsto dalle leggi dell'elettrodinamica, finendo per cadere sul nucleo.
- Gli atomi sono in grado di emettere e assorbire radiazioni elettromagnetiche secondo modalità che il modello planetario di Rutherford non è in grado di giustificare.



25

Teoria atomica moderna

Nell'ultimo secolo, diversi modelli hanno tentato di spiegare il moto degli elettroni all'interno degli atomi. Il modello di Niels Bohr, fra i più noti, prevedeva che gli elettroni si muovessero intorno al nucleo atomico seguendo traiettorie circolari ben definite, alle quali era associata una certa energia.

La nascita e lo sviluppo della fisica quantistica nel secolo scorso hanno portato alla **teoria atomica moderna**.

26

Numeri quantici e orbitali

È possibile valutare la probabilità della presenza di un elettrone in una certa regione di spazio intorno al nucleo, detta orbitale.

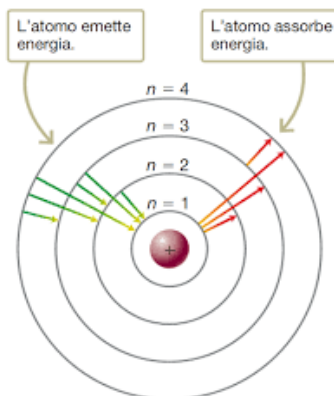
Inoltre, i livelli energetici che possono essere assunti da un elettrone sono definiti con regole dettate dalla fisica quantistica ... l'energia è *quantizzata*.

27

Numeri quantici e orbitali

1913... l'atomo di idrogeno secondo Niels Bohr:

1. L'elettrone (e^-) percorre solo determinate orbite circolari, chiamate **orbite stazionarie**, senza assorbire o emettere energia, e senza cadere nel nucleo, e l'energia dell'elettrone su ciascuna orbita è determinata e costante;
2. All'elettrone sono permesse solo certe orbite, con determinati valori di energia, cioè le orbite sono **quantizzate**;

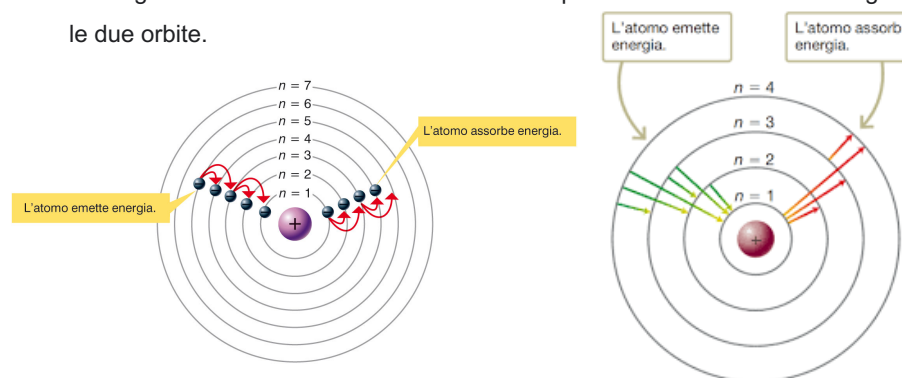


28

Numeri quantici e orbitali

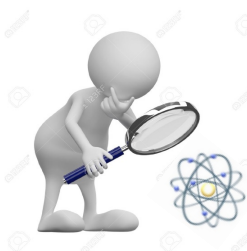
1913... l'atomo di idrogeno secondo Niels Bohr:

3. Per passare da un'orbita a un'altra di livello energetico più elevato, l'elettrone assorbe un quanto di energia fornita (ad es. sotto forma di calore);
4. Quando un e^- cade su un livello di energia inferiore emette un fotone di opportuna frequenza;
5. L'energia del fotone emesso o assorbito corrisponde alla differenza di energia fra le due orbite.



29

Teoria atomica moderna



....ma quindi dove si trovano gli elettroni ??????

La **meccanica quantistica** è la parte della chimica-fisica che descrive il comportamento di elettroni, fotoni e altre particelle microscopiche, basandosi su leggi statistiche.

Il **principio di indeterminazione di Heisenberg** afferma che non è possibile conoscere a ogni istante, contemporaneamente, la posizione e la velocità di un elettrone.

30

Struttura dell'atomo

La traiettoria dell'elettrone è determinata dalla meccanica quantistica

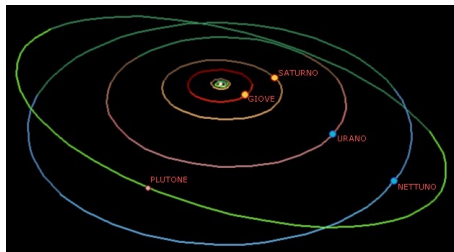
- 1) le orbite degli elettroni sono chiamate orbitali;
- 2) La distanza dell'orbitale dal nucleo è indicata dal numero quantico principale n (1, 2, 3...);
- 3) La particolare forma dell'orbitale è indicata dalle lettere s, p, d, f;
- 4) gli orbitali sono funzioni di probabilità: rappresentano dove si trova l'e⁻ con maggior probabilità;
- 5) l'e⁻ non si trova in qualunque punto dello spazio ma solo su orbitali discreti anche se infiniti;
- 6) su ogni orbitale vi possono essere al massimo due e⁻ con spin opposto.

31

Struttura dell'atomo

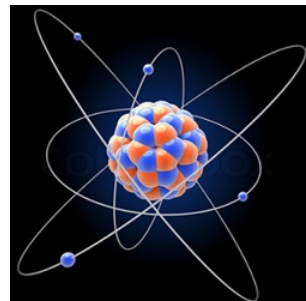
L'orbitale è una funzione d'onda elettronica caratterizzata da una particolare terna di valori di n , l e m , chiamati **numeri quantici**.

ORBITA



VS

ORBITALE



32

Struttura dell'atomo

L'orbitale è una funzione d'onda elettronica caratterizzata da una particolare terna di valori di **n** , **l** e **m** , chiamati **numeri quantici**, tre numeri interi che definiscono lo stato quantico dell'elettrone e ne specificano il valore di una proprietà.

- Il **numero quantico principale n**
($n = 1, 2, 3, \dots, 7$) definisce il livello energetico dell'elettrone che è proporzionale alla distanza dal nucleo.
- Il **numero quantico secondario l**
($0 \leq l \leq n-1$) definisce le caratteristiche geometriche dell'orbitale in un determinato livello (sottolivello energetico). Gli orbitali possibili per i differenti valori di l sono indicati con le lettere minuscole s, p, d, f

valori di l	0	1	2	3
lettera	s	p	d	f

33

Struttura dell'atomo

- Il **numero quantico magnetico m**
($-l \leq m \leq +l$) indica l'orientamento dell'orbitale nello spazio, e definisce quanti orbitali della stessa forma, ma con orientazione diversa, possono coesistere in un sottolivello.
- Il **numero quantico di spin m_s**
($m_s = \pm \frac{1}{2}$) indica il valore di spin che può essere assunto dall'elettrone. Infatti, l'elettrone oltre al movimento intorno al nucleo, ha la possibilità di ruotare su se stesso (come una trottola), con un moto in senso orario o antiorario.

34

Struttura dell'atomo

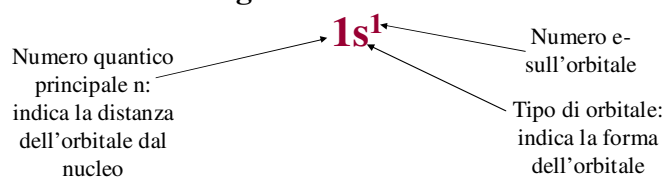
La traiettoria dell'elettrone è determinata dalla meccanica quantistica

- 1) le orbite degli elettroni sono chiamate orbitali;
- 2) La distanza dell'orbitale dal nucleo è indicata dal numero quantico principale n (1, 2, 3...);
- 3) La particolare forma dell'orbitale è indicata dalle lettere s, p, d, f;
- 4) gli orbitali sono funzioni di probabilità: rappresentano dove si trova l'e⁻ con maggior probabilità;
- 5) l'e⁻ non si trova in qualunque punto dello spazio ma solo su orbitali discreti anche se infiniti;
- 6) su ogni orbitale vi possono essere al massimo due e⁻ con spin opposto.

35

Costruiamo la configurazione elettronica degli atomi

IDROGENO H
un solo e⁻ sull'orbitale 1s
configurazione elettronica:

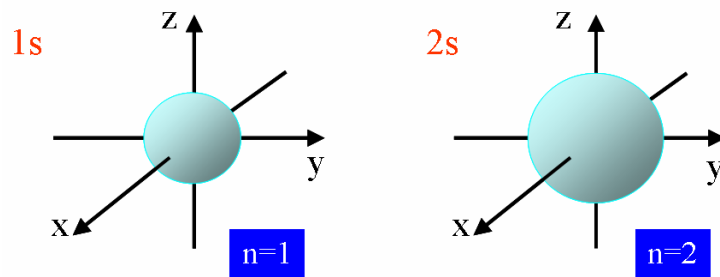


HELIO He
due e⁻ sull'orbitale 1s
configurazione elettronica:
1s²

36

Esempi di orbitali

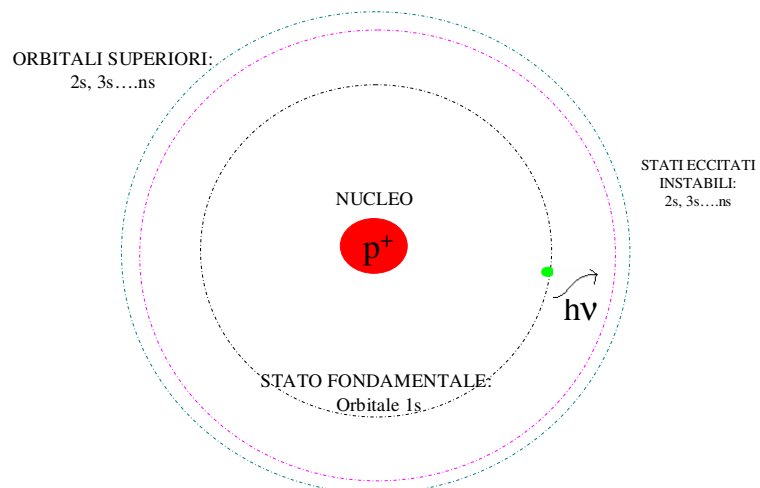
SFERICI DI TIPO s



L'1s è l'orbitale più vicino al nucleo.
 Sempre più lontano dal nucleo si hanno il 2s, 3s.....ns.
 n = numero quantico principale

37

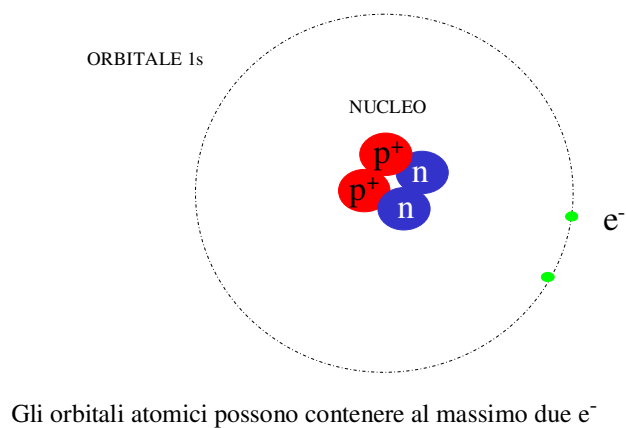
ATOMO DI IDROGENO H



38

ATOMO DI ELIO: He

Stato fondamentale



39

CONTINUIAMO A COSTRUIRE GLI ATOMI

Gli elementi con 3 e 4 e^-

LITIO Li

due e^- sull'orbitale 1s

un e^- sull'orbitale 2s

configurazione elettronica:



BERILLIO Be

due e^- sull'orbitale 1s

due e^- sull'orbitale 2s

configurazione elettronica:



40

La configurazione elettronica degli elementi

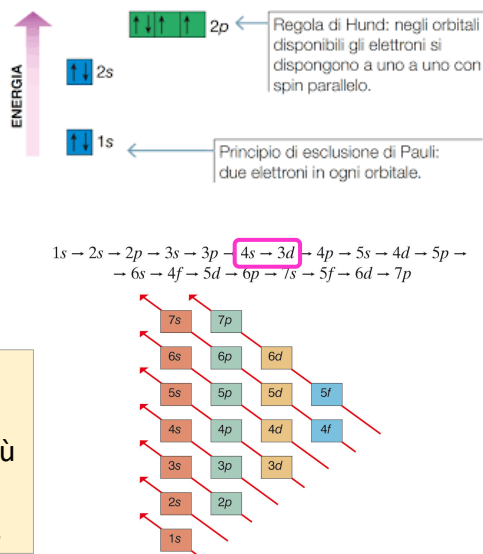
Regole di Aufbau:

1: principio di minima energia:

Gli elettroni si dispongono spontaneamente negli orbitali vuoti meno energetici.

La successione degli orbitali in cui sistemare gli elettroni in ordine di energia crescente è:

Gli elettroni occupano prima gli orbitali a energia più bassa, poi quelli a energia più elevata.



Il numero massimo di elettroni che i livelli principali di energia possono contenere si ricava da $2n^2$

41

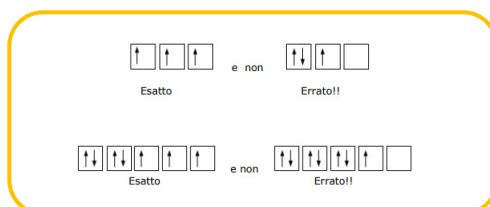
La configurazione elettronica degli elementi

2. Principio di esclusione di Pauli:

Ogni orbitale può contenere al massimo 2 elettroni i quali saturano l'orbitale disponendosi con spin antiparalleli. Si usa dire che l'orbitale che contiene 2 e⁻ è un orbitale **pieno**, mentre quello che ne contiene uno solo è un orbitale **semivuoto** o **pieno a metà**.

3. Principio di massima molteplicità di Hund:

Gli elettroni, nel caso di orbitali di uguale energia, tendono ad occupare il maggior numero possibile di orbitali, disponendosi uno per orbitale con spin parallelo fino a semisaturarli tutti e, successivamente, li saturano seguendo il principio di esclusione di Pauli.



42

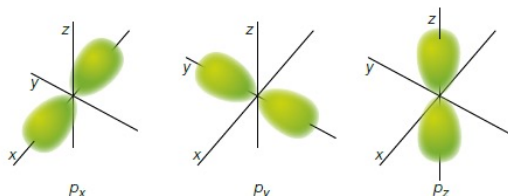
La configurazione elettronica degli elementi

GLI ORBITALI s SONO RIEMPITI PRIMA DEGLI ORBITALI p

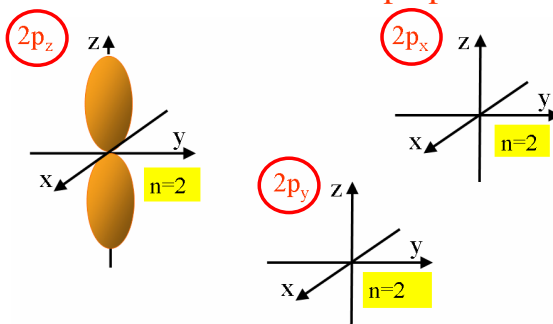
Numero Atomico	Simbolo Elettronico	Rappresentazioni della configurazione elettronica	
3	•Li	(He)2s ↑	1s ² 2s ¹
4	:Be	(He)2s ↑↓	1s ² 2s ²
5	:B•	(He)2s ↑↓ 2p ↑	1s ² 2s ² 2p ¹
6	:C•	(He)2s ↑↓ 2p ↑ ↑	1s ² 2s ² 2p ²
7	:N•	(He)2s ↑↓ 2p ↑ ↑ ↑	1s ² 2s ² 2p ³
8	:O:	(He)2s ↑↓ 2p ↑ ↓ ↑	1s ² 2s ² 2p ⁴
9	:F:	(He)2s ↑↓ 2p ↑ ↓ ↑ ↓	1s ² 2s ² 2p ⁵
10	:Ne:	(He)2s ↑↓ 2p ↑ ↓ ↑ ↓ ↑	1s ² 2s ² 2p ⁶
11	•Na	(Ne)3s ↑	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹

43

Esempi di orbitali

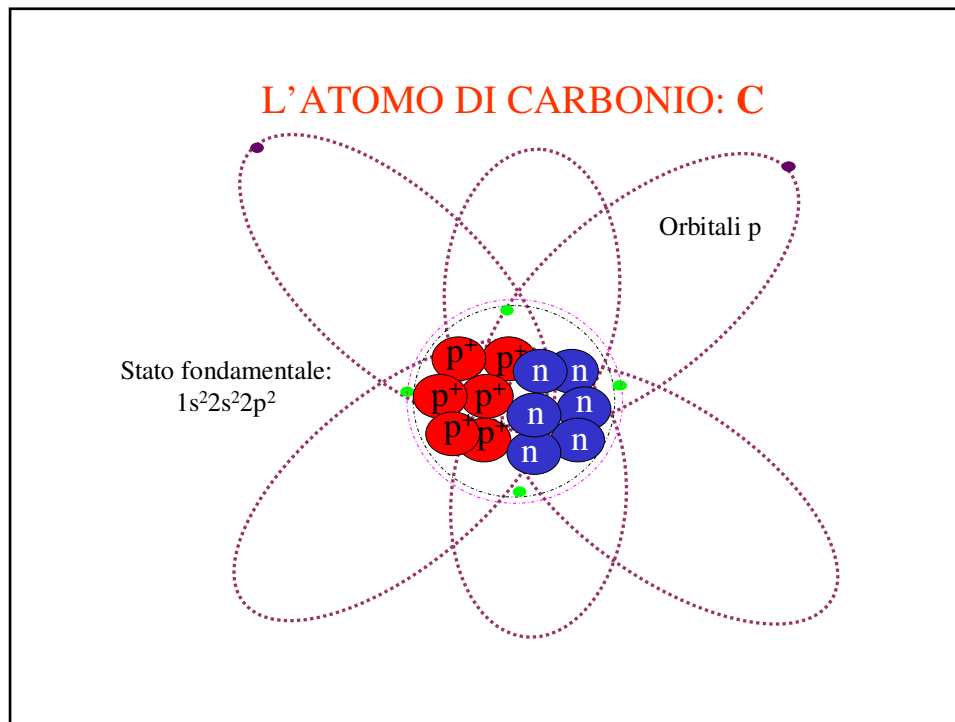


ORBITALI tipo p

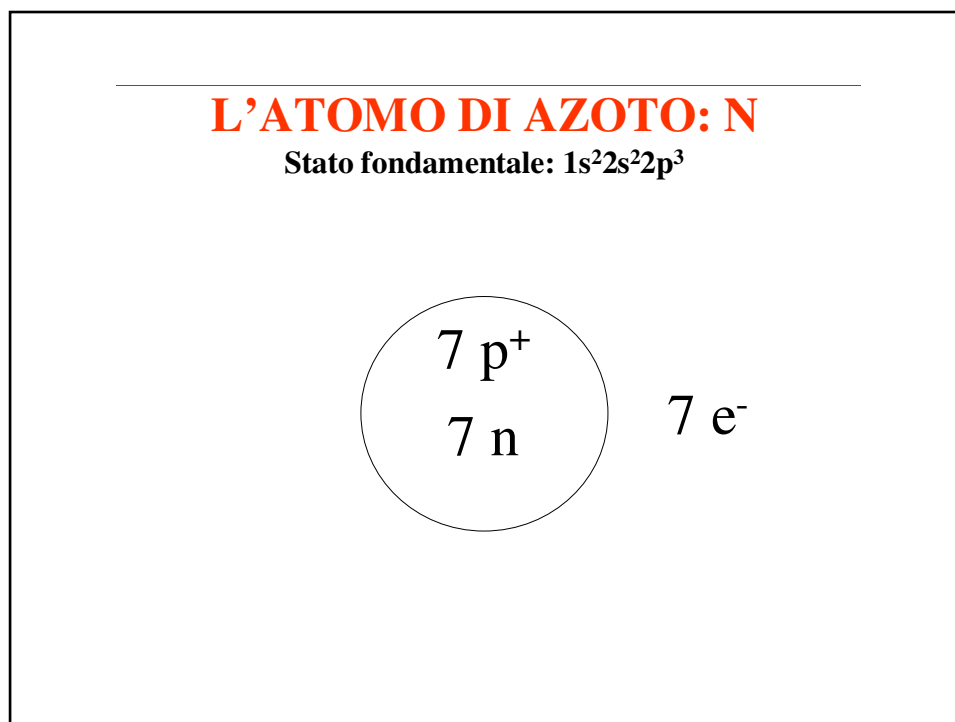


Vi sono tre orbitali tipo p: p_x , p_y , p_z per ogni numero quantico principale n , a partire da $n=2$.

44



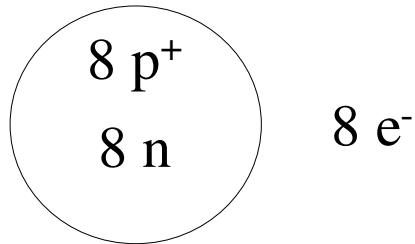
45



46

L'ATOMO DI OSSIGENO: O

Stato fondamentale: $1s^2 2s^2 2p^4$



I tre orbitali p possono contenere 6 e⁻

47

L'ATOMO DI NEON: Ne

Stato fondamentale: $1s^2 2s^2 2p^6$

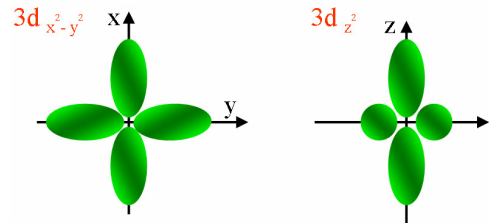
IL NEON È UN ATOMO STABILE, PERCHÉ?

Il riempimento completo degli orbitali più esterni con lo stesso n rende gli atomi stabili e poco reattivi (gas nobili).

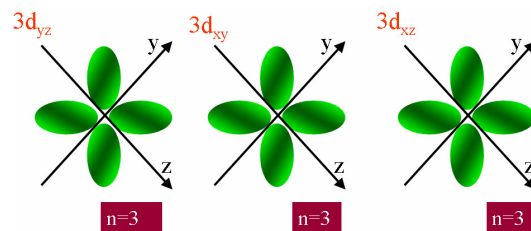
Nel caso del neon occorrono 8 e⁻ con configurazione $2s^2 2p^6$ (regola dell'ottetto).

48

Altri esempi di orbitali



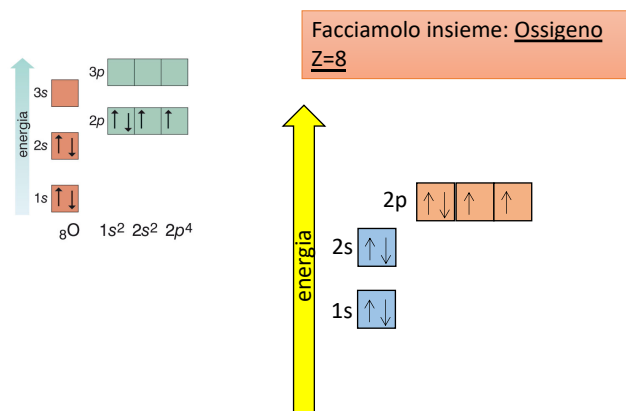
Con $n = 3$ si possono avere gli orbitali d



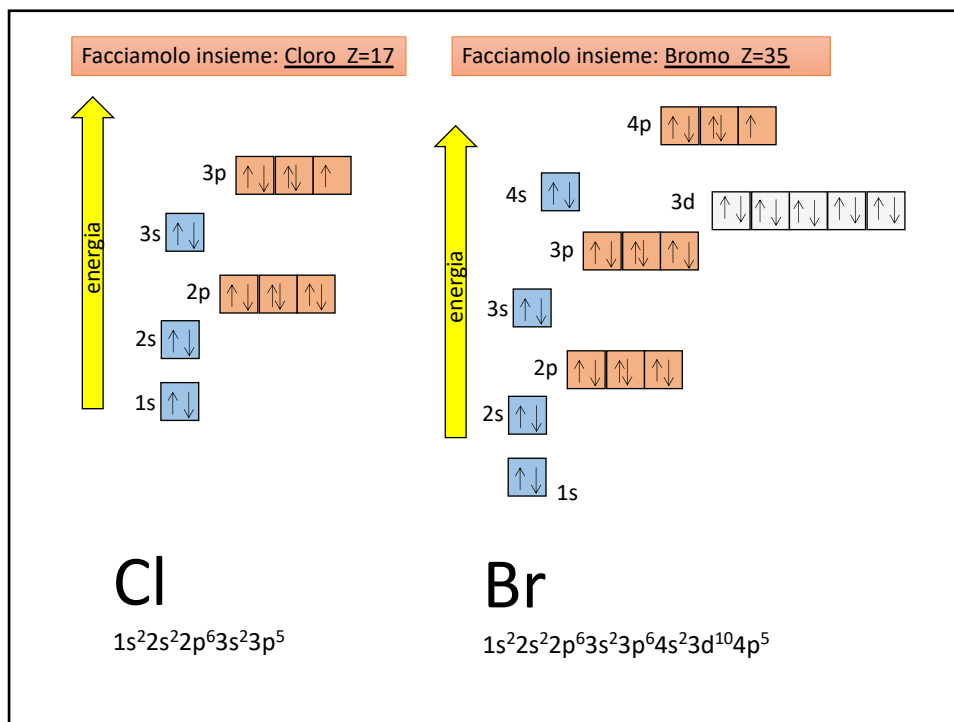
49

Regola di Hund: se ci sono orbitali allo stesso livello energetico, prima si colloca un elettrone su ciascun orbitale vuoto, poi si completano gli orbitali semipieni.

Nella configurazione elettronica più stabile di un atomo, gli elettroni appartenenti a un medesimo sottolivello tendono ad assumere lo stesso spin.



50



51

Rappresentazione simbolica dell'atomo

Numero di massa: $n + p$
 Numero atomico: p oppure e^-

Simbolo

$^{12}_6\text{C}$

$^{14}_6\text{C}$

Isotopi: atomi con
stesso numero atomico diverso numero di massa

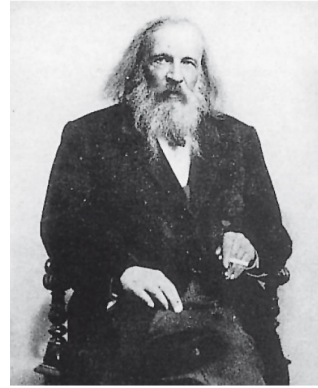
Nella Tavola Periodica è riportata la massa atomica relativa: massa media ponderata, rispetto all'abbondanza in natura, di tutti gli isotopi

52

Verso il sistema periodico

Nel 1869 **Dmitrij Mendeleev** ordinò i 63 elementi noti in base alla massa atomica crescente, e costruì la prima tavola periodica degli elementi.

Mendeleev determinò anche la legge della periodicità attraverso la quale poté prevedere le proprietà di elementi ancora sconosciuti e scoperti anni dopo.



53

La moderna tavola periodica

Tavola Periodica

La tavola periodica moderna è organizzata in gruppi (1-18) e periodi (1-7). Gli elementi sono colorati in base alle loro proprietà chimiche e fisiche.

Legenda:

- Alcali:** Gruppo 1 (Li, Na, K, Rb, Cs, Fr)
- Alcalinoterrali:** Gruppo 2 (Be, Mg, Ca, Sr, Ba, Ra)
- Metalli di transizione:** Gruppi 3-10 (Sc, Ti, V, Cr, Mn, Fe, Co, Ni, Cu, Zn, Ga, Ge, As, Se, Br, Kr, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Xe, Ba, La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Po, At, Rn, Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lr)
- Metalloidi:** Gruppo 11 (Cu, Ag, Au)
- Non metalli:** Gruppi 12-18 (Zn, Ga, Ge, As, Se, Br, Kr, Rb, Sr, Y, Zr, Nb, Mo, Tc, Ru, Rh, Pd, Ag, Cd, In, Sn, Sb, Te, I, Xe, Ba, La, Ce, Pr, Nd, Pm, Sm, Eu, Gd, Tb, Dy, Ho, Er, Tm, Yb, Lu, Hf, Ta, W, Re, Os, Ir, Pt, Au, Hg, Tl, Pb, Bi, Po, At, Rn, Ac, Th, Pa, U, Np, Pu, Am, Cm, Bk, Cf, Es, Fm, Md, No, Lr)
- Gas nobili:** Gruppo 18 (He, Ne, Ar, Kr, Xe, Rn)

Metalli: Alcali, Alcalinoterrali, Metalli di transizione, Metalloidi, Non metalli, Gas nobili.

Non metalli: Poliatomici, Datomici, Gas nobili.

Antonio Ciccolella 2017

54

La moderna tavola periodica

1. Gli elementi della moderna tavola periodica sono 118;
2. la posizione di ciascun elemento sulla tavola dipende dal suo numero atomico (Z);
3. le righe orizzontali formano 7 periodi, ciascuno dei quali indica il livello energetico a cui si trovano gli elettroni di valenza degli elementi che li compongono;

57

La moderna tavola periodica

4. gli elementi che chiudono i periodi sono i **gas nobili**, così chiamati per la scarsissima reattività dovuta alla loro configurazione elettronica stabile;
5. gli elementi verticali formano i **gruppi**;
6. fra il gruppo II e il gruppo III si trovano gli **elementi di transizione**;
7. in fondo alla tavola periodica ci sono due file di 14 elementi metallici costituenti le serie dei **lantanidi** e degli **attinidi**.

He
2
Ne
10
Ar
18
Kr
36
Xe
54
Rn
86
Uuo
118

58

	1	2							3	4	5	6	7	8
1	1 H													2 He
2	3 Li	4 Be							5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg							13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca							31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr							49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba							81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra							115 Nh	116 Fl	117 Ts	118 Og		

TAVOLA PERIODICA CORTA (GRUPPI)

I GRUPPI 1 E 2 (COLONNE VERDI) POSSEGGONO ORBITALI ESTERNI DI TIPO s. Interagendo con altri atomi, tendono a cedere l'e-

I GRUPPI DAL 3 ALL'8 (COLONNE CELESTI) POSSEGGONO ORBITALI ESTERNI DI TIPO p. Interagendo con altri atomi hanno tendenza crescente ad acquistare e- (eccetto i gas nobili)

59

	1	2							3	4	5	6	7	8
1	1 H													2 He
2	3 Li	4 Be							5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg							13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca							31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr							49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba							81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra							115 Nh	116 Fl	117 Ts	118 Og		

TAVOLA PERIODICA CORTA (PERIODI)

LA RIGA CHE INIZIA CON H CORRISPONDE AL PRIMO PERIODO (numero quantico principale n=1), QUELLA CHE INIZIA CON Li AL SECONDO (n=2), CON Na AL TERZO (n=3), K AL QUARTO (n=4), ETC.

60

1 2		3 4 5 6 7 8																
1	<div>H</div>	TAVOLA PERIODICA COMPLETA																<div>He</div>
2	<div>Li</div> <div>Be</div>																	<div>B</div> <div>C</div> <div>N</div> <div>O</div> <div>F</div> <div>Ne</div>
3	<div>Na</div> <div>Mg</div>																	<div>Al</div> <div>Si</div> <div>P</div> <div>S</div> <div>Cl</div> <div>Ar</div>
4	<div>K</div> <div>Ca</div>	<div>Sc</div> <div>Ti</div> <div>V</div> <div>Cr</div> <div>Mn</div> <div>Fe</div> <div>Co</div> <div>Ni</div> <div>Cu</div> <div>Zn</div>	<div>Ga</div> <div>Ge</div> <div>As</div> <div>Se</div> <div>Br</div> <div>Kr</div>															
5	<div>Rb</div> <div>Sr</div>	<div>Y</div> <div>Zr</div> <div>Nb</div> <div>Mo</div> <div>Tc</div> <div>Ru</div> <div>Rh</div> <div>Pd</div> <div>Ag</div> <div>Cd</div>	<div>In</div> <div>Sn</div> <div>Sb</div> <div>Te</div> <div>I</div> <div>Xe</div>															
6	<div>Cs</div> <div>Ba</div>	<div>La</div> <div>Hf</div> <div>Ta</div> <div>W</div> <div>Re</div> <div>Os</div> <div>Ir</div> <div>Pt</div> <div>Au</div> <div>Hg</div>	<div>Tl</div> <div>Pb</div> <div>Bi</div> <div>Po</div> <div>At</div> <div>Rn</div>															
7	<div>Fr</div> <div>Ra</div>	<div>Ac</div> <div>Unq</div> <div>Unp</div> <div>Unh</div>	GLI ELEMENTI TRA I GRUPPI 2 E 3 (COLORE GRIGIO) POSSEGGONO ORBITALI DI TIPO d E DANNO INIZIO ALLA SERIE DEGLI ELEMENTI DI TRANSIZIONE O METALLI DI TRANSIZIONE												<div>Lr</div> <div>Yb</div> <div>Tm</div> <div>Er</div> <div>Hf</div> <div>Ta</div> <div>W</div> <div>Re</div> <div>Os</div> <div>Ir</div> <div>Pt</div> <div>Au</div> <div>Hg</div> <div>Cd</div> <div>Ag</div> <div>Pd</div> <div>Ru</div> <div>Tc</div> <div>Mo</div> <div>Nb</div> <div>Zr</div> <div>Y</div> <div>Sr</div> <div>Rb</div> <div>K</div> <div>Ca</div> <div>Sc</div> <div>Ti</div> <div>V</div> <div>Cr</div> <div>Mn</div> <div>Fe</div> <div>Co</div> <div>Ni</div> <div>Cu</div> <div>Zn</div> <div>Ga</div> <div>Ge</div> <div>As</div> <div>Se</div> <div>Br</div> <div>Kr</div> <div>Xe</div> <div>I</div> <div>Te</div> <div>Sb</div> <div>Sn</div> <div>In</div> <div>Cd</div> <div>Ag</div> <div>Pt</div> <div>Ir</div> <div>Os</div> <div>Re</div> <div>W</div> <div>Ta</div> <div>Hf</div> <div>La</div> <div>Ba</div> <div>Cs</div> <div>Fr</div> <div>Ra</div> <div>Ac</div> <div>Unq</div> <div>Unp</div> <div>Unh</div>			
ALLE SERIE DI LANTANIDI E ATTINIDI, CON RIEMPIMENTO DEGLI f		<div>Ce</div> <div>Pr</div> <div>Nd</div> <div>Pm</div> <div>Sm</div> <div>Eu</div> <div>Gd</div> <div>Tb</div> <div>Dy</div> <div>Ho</div> <div>Er</div> <div>Tm</div> <div>Yb</div> <div>Lu</div>	<div>Th</div> <div>Pa</div> <div>U</div> <div>Np</div> <div>Pu</div> <div>Am</div> <div>Cm</div> <div>Bk</div> <div>Cf</div> <div>Es</div> <div>Fm</div> <div>Md</div> <div>No</div> <div>Lw</div>															

Le proprietà periodiche degli elementi

Le proprietà degli elementi variano con regolarità lungo la tavola periodica in base alla variazione periodica della configurazione elettronica.

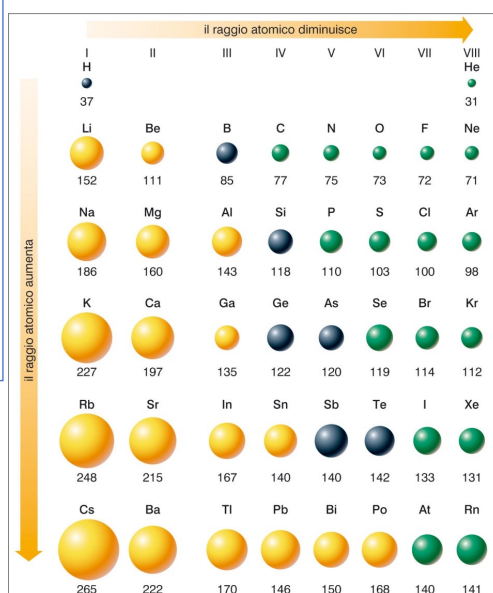
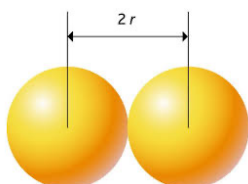
Sono proprietà periodiche il
raggio atomico,
l'energia di ionizzazione,
l'affinità elettronica e
l'elettronegatività.

63

Le proprietà periodiche degli elementi

Il **raggio atomico** (\AA) è la metà della distanza minima di avvicinamento tra i nuclei di due atomi dello stesso elemento.

Il raggio atomico aumenta lungo un gruppo e diminuisce lungo un periodo.

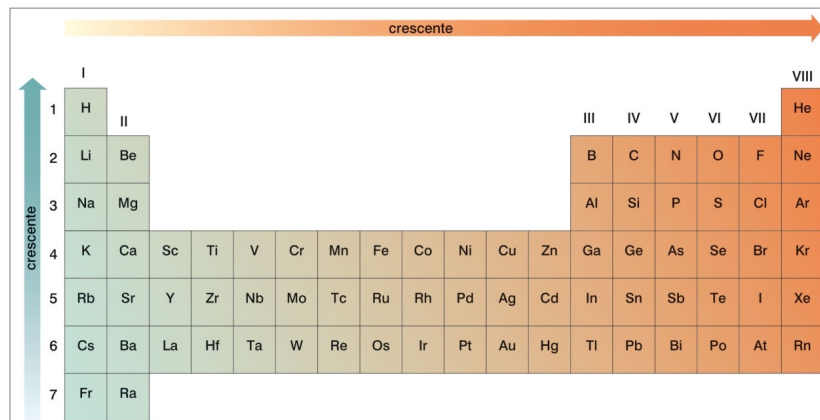
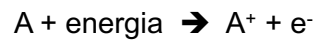


64

Le proprietà periodiche degli elementi

L'energia di ionizzazione è l'energia necessaria per rimuovere un elettrone da un atomo isolato.

L'energia di prima ionizzazione aumenta lungo un periodo e diminuisce lungo un gruppo.



65

Le proprietà periodiche degli elementi

L'affinità elettronica è l'energia che si libera quando un atomo in fase gassosa cattura un elettrone.

L'affinità elettronica, come l'energia di prima ionizzazione, aumenta lungo un periodo e diminuisce lungo un gruppo.

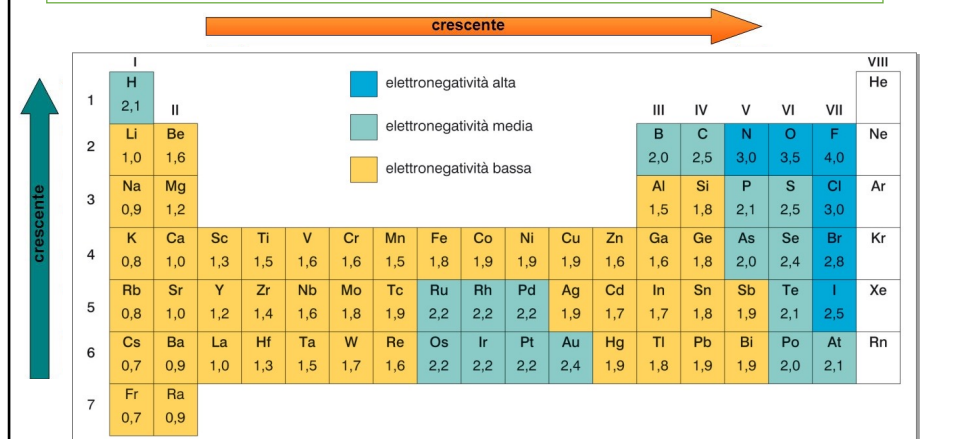


66

Le proprietà periodiche degli elementi

L'**elettronegatività** di un elemento misura la sua tendenza ad attrarre gli elettroni di legame da un altro elemento.

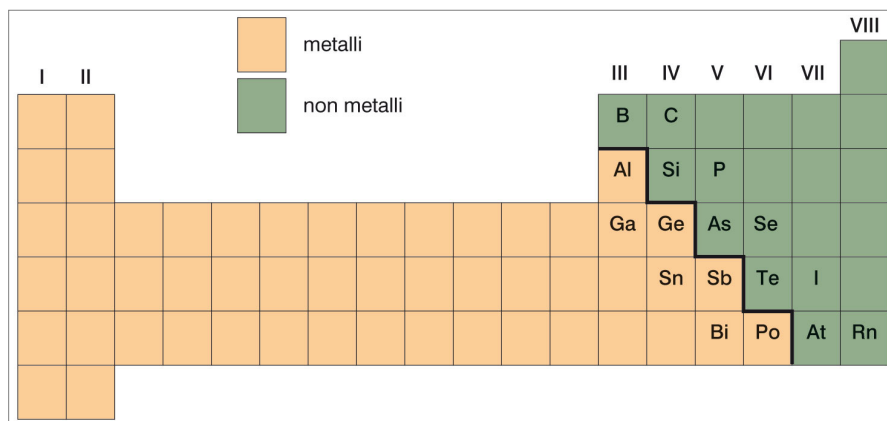
L'elettronegatività aumenta lungo un periodo e diminuisce lungo un gruppo.



67

Metalli, non metalli e semimetalli

A seconda delle loro proprietà fisiche e chimiche gli elementi si possono suddividere in **metalli**, **non metalli** e **semimetalli**.



68

Metalli, non metalli e semimetalli

metalli
non metalli

I **metalli** sono più di 80 e occupano la parte sinistra della tavola periodica.

Gli elementi metallici sono solidi, duri, lucenti, malleabili, duttili e conducono calore ed elettricità.

Le proprietà chimiche dei metalli dipendono dalla loro tendenza a perdere elettroni diventando ioni positivi.

Le proprietà fisiche dei metalli dipendono dal tipo di legame tra gli atomi.

69

Metalli, non metalli e semimetalli

metalli
non metalli

I **non metalli** occupano la parte destra della tavola periodica.

Le proprietà chimiche dei non metalli dipendono dalla loro capacità di accettare elettroni diventando ioni negativi.

Gli elementi del gruppo VII sono detti **alogeni**.

I **semimetalli** presentano sia comportamento metallico sia non metallico.

I semimetalli si trovano lungo il confine che separa i metalli e i non metalli.

70

Il Legame Chimico

Perché gli atomi si legano ???

Gli atomi difficilmente esistono allo stato isolato, essi tendono ad unirsi tra loro, sia che appartengano o meno allo stesso elemento, per formare strutture più stabili.

Quando si uniscono 2 atomi, le sistemazioni degli elettroni in entrambi si modificano e, se in questo processo si arriva ad un contenuto energetico inferiore a quello dei 2 atomi separati, il sistema ha acquistato una maggiore stabilità e tra i 2 atomi si è stabilito un legame, detto **LEGAME CHIMICO**.

I legami chimici fondamentali sono classificati in:

- **legame ionico o eteropolare o elettrostatico**
- **legame covalente**
- **legame metallico**

71

Il Legame Chimico

1. L'energia di legame
2. I gas nobili e le regole dell'ottetto
3. Il legame covalente
4. La scala dell'elettronegatività e i legami
5. Il legame covalente dativo
6. Il legame ionico
7. Il legame metallico

72

Il Legame Chimico

GLI ATOMI INTERAGISCONO FORMANDO
LEGAMI MOLECOLARI

NEI LEGAMI MOLECOLARI GLI ATOMI
POSSONO CEDERE, ACQUISTARE O METTERE
IN COMUNE GLI e^- PIÙ ESTERNI (e^- DI
VALENZA)

OGNI ATOMO FORMA TANTI LEGAMI QUANTI
SONO GLI ELETTRONI NECESSARI PER
REALIZZARE ATTORNO A SÉ UN "OTTETTO"

73

L'energia di legame

L'**energia di legame** è la quantità di energia che è necessario fornire a una mole di sostanza per rompere il legame che tiene insieme i suoi elementi.

Nonostante l'enorme numero di combinazioni possibili fra gli atomi, non tutte sono realizzabili: un composto, e quindi un legame chimico, si forma solo se gli atomi legati fra loro hanno una energia potenziale minore dei singoli atomi separati che lo costituiscono.



74

I gas nobili e le regole dell'ottetto

Quando gli atomi si avvicinano per formare un legame solo gli elettroni più esterni partecipano all'operazione.

Gli elettroni dello strato più esterno vengono chiamati **elettroni di valenza** o **di legame**.

La **regola dell'ottetto** fu enunciata da Lewis nel 1916.

Un atomo è particolarmente stabile quando ha otto elettroni nello strato di valenza...

Quando gli atomi reagiscono tra loro, essi modificano la propria struttura elettronica in modo da acquisire la configurazione tipica dei gas nobili (con 8 elettroni nel livello esterno).

La **valenza** rappresenta il numero di elettroni che un atomo guadagna, perde o mette in comune quando si lega con altri atomi.

75

I gas nobili e le regole dell'ottetto

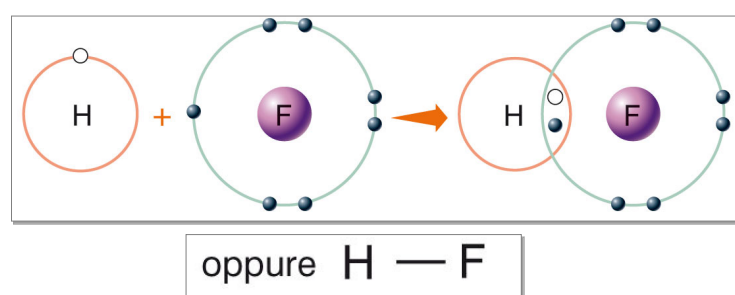
Il motivo della stabilità dei gas nobili risiede nel fatto che la loro configurazione elettronica presenta otto elettroni (due nel caso dell'elio) nello strato di valenza, che quindi è completo.

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

76

Il legame covalente

- Il legame covalente si forma quando due atomi mettono in comune una coppia di elettroni.
- Se i due atomi sono identici il legame è covalente puro.
- Gli elettroni sono messi in compartecipazione per raggiungere l'ottetto e appartengono in contemporanea a entrambi gli atomi che li condividono.



77

Il legame covalente

- Il **legame covalente** è caratteristico delle molecole diatomiche, ma la tendenza a mettere in comune elettroni si manifesta anche tra atomi di natura diversa (HF, H₂O, NH₃, CH₄ ecc.).
- Il legame covalente può essere
 - ❖ **singolo**: se è condivisa una sola coppia di elettroni;
 - ❖ **doppio**: se sono condivise due coppie di elettroni;
 - ❖ **triplo**: se sono condivise tre coppie di elettroni.

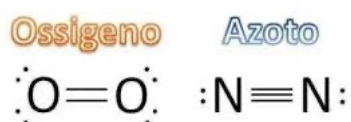
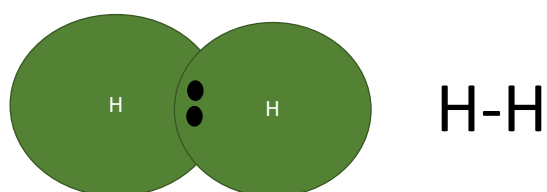
Legame	Energia (kJ/mol)	Lunghezza (Å)
singolo	347	1,54
doppio	598	1,34
triplo	812	1,20

78

La scala dell'elettronegatività e i legami

Se due atomi identici sono uniti da legami covalenti, esercitano la stessa forza di attrazione sugli elettroni di legame.

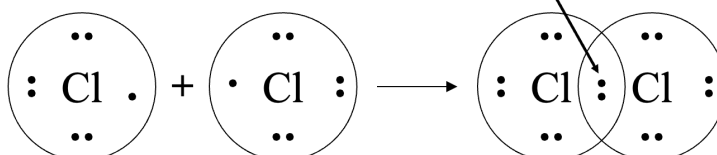
Pertanto il legame covalente sarà **covalente puro**.



79

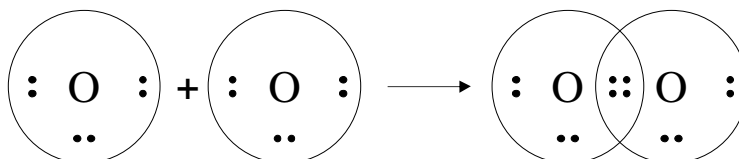
Il legame covalente

LEGAME COVALENTE:
fra elementi dello stesso gruppo:
 Cl_2



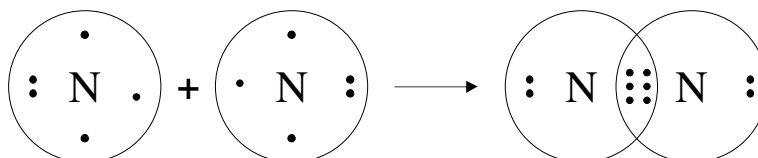
1. Gli elettroni di legame restano in comune ad entrambi gli atomi completando il loro ottetto;
2. La carica elettronica in comune è il “collante” di segno negativo che lega i nuclei.

80

Il legame covalenteLegame covalente puro O_2 

Legame covalente puro:
 si forma fra atomi con la stessa tendenza ad attrarre
 elettroni (uguale elettronegatività)

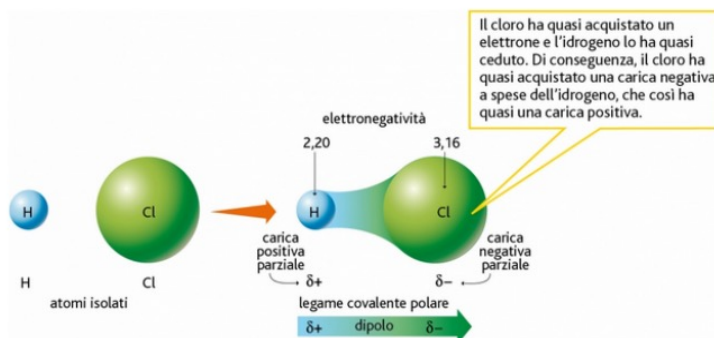
81

Il legame covalenteLegame covalente puro N_2 

82

La scala dell'elettronegatività e i legami

Atomi di natura diversa possono mettere in compartecipazione i loro elettroni di valenza, ma esercitano sugli elettroni di legame una diversa forza attrattiva (elettronegatività) e si forma così un **legame covalente polare**.



83

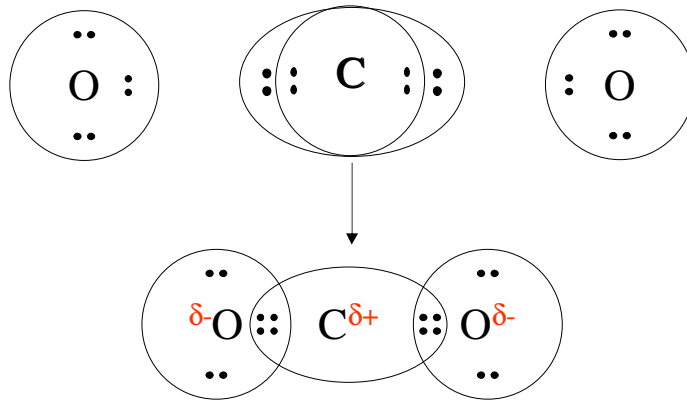
Il legame covalente

Legame covalente polare: si forma fra atomi con diversa tendenza ad attrarre elettroni (diversa elettronegatività)

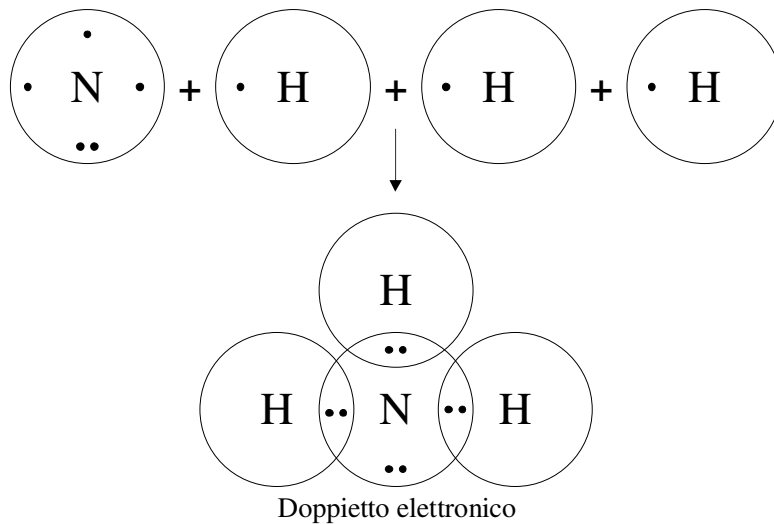
Gli elettroni di legame non sono equamente condivisi. L'atomo più elettronegativo acquista una parziale carica negativa, mentre l'altro acquista una parziale carica positiva.

La coppia di ioni che si forma è definita **DIPOLO**

84

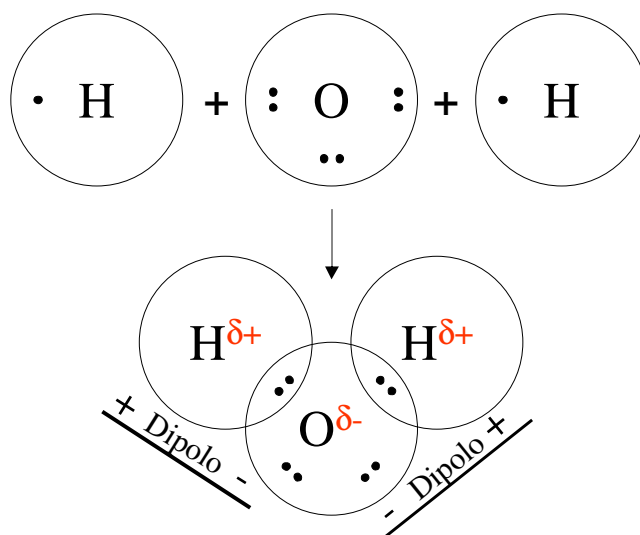
Il legame covalenteLegame covalente polare CO_2 

85

Il legame covalenteLegame covalente polare NH_3 

86

Legame covalente polare H₂O

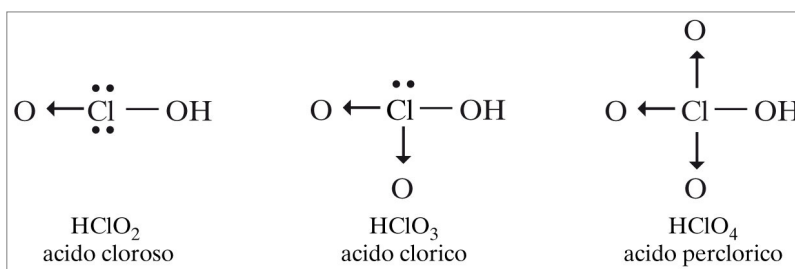
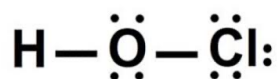


87

Il legame covalente dativo

Il **legame covalente dativo** o di **coordinazione** 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**.



88

Legame ionico

Se la differenza di elettronegatività fra i due elementi che intendono legarsi è superiore a 1,9 avviene un trasferimento di elettroni da un atomo all'altro.

L'atomo più elettronegativo diventa uno ione negativo, l'altro uno ione positivo.

Il legame ionico è dovuto alla forza di attrazione elettrostatica che tiene uniti gli ioni di carica opposta.

Una volta formatosi, lo ione negativo assume la configurazione del gas nobile successivo, mentre lo ione positivo assume quella del gas nobile che lo precede nella tavola periodica.

89

Legame ionico



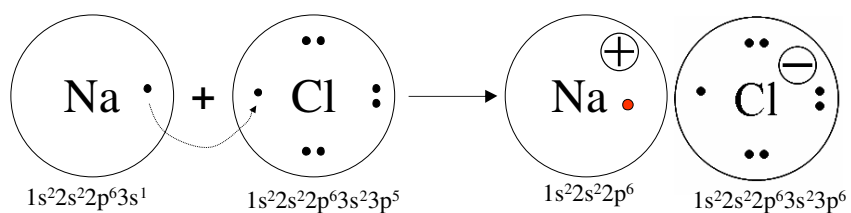
Dalla posizione sulla tavola periodica si può dedurre che:

- gli elementi metallici (a sinistra nella tavola periodica) tendono a cedere elettroni diventando ioni positivi;
- i non metalli (a destra nella tavola periodica) tendono ad acquistare elettroni trasformandosi in ioni negativi.

90

Legame ionico

tra elementi del 1 e 7 gruppo

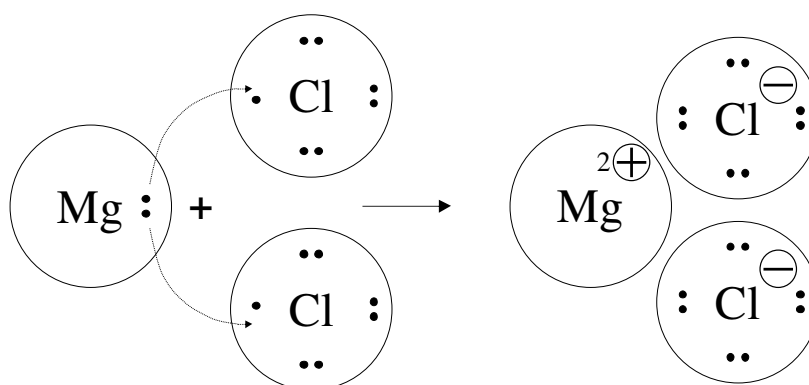


L'e⁻ del Na è completamente spostato sul Cl
 Si formano un anione ed un catione e il legame molecolare è di tipo
 elettrostatico

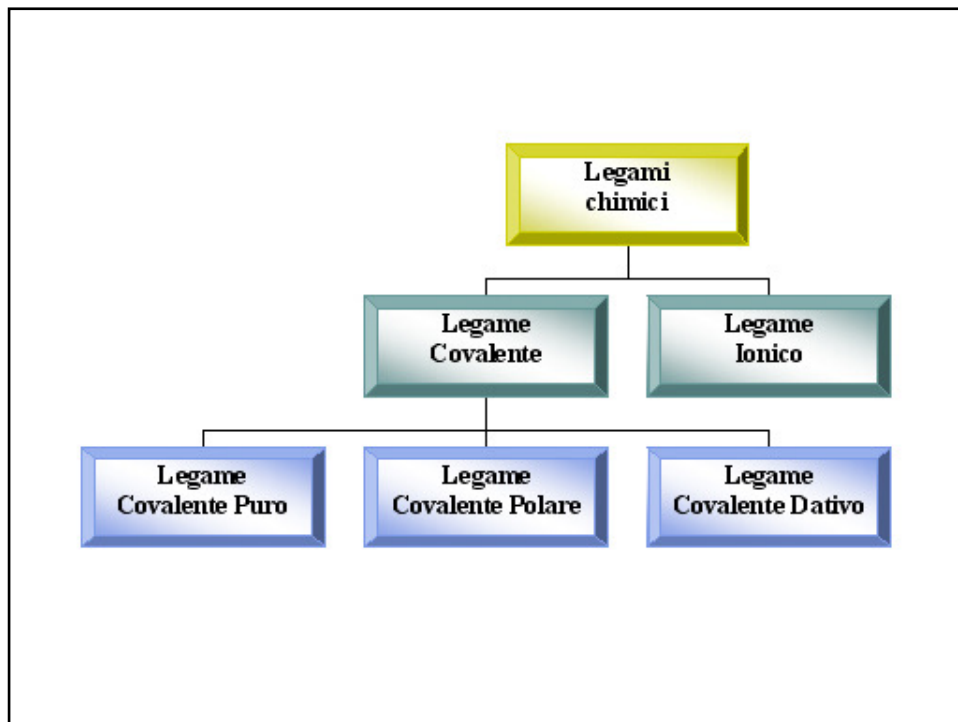
91

Legame ionico

tra elementi del 2 e 7 gruppo



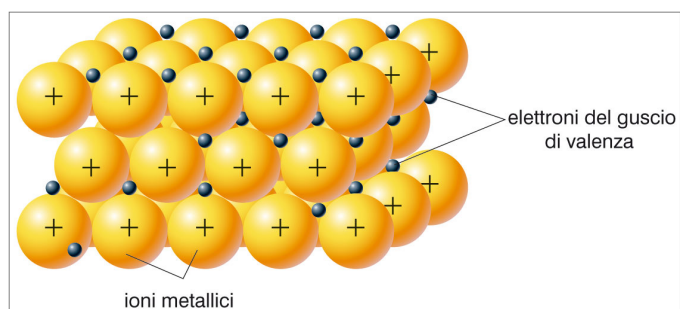
92



93

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.

94

La forma delle molecole e le forze intermolecolari

1. La forma delle molecole
2. La teoria VSEPR
3. Molecole polari e non polari
4. Le forze intermolecolari

Molte proprietà dei composti covalenti dipendono dalla disposizione degli atomi nelle molecole.

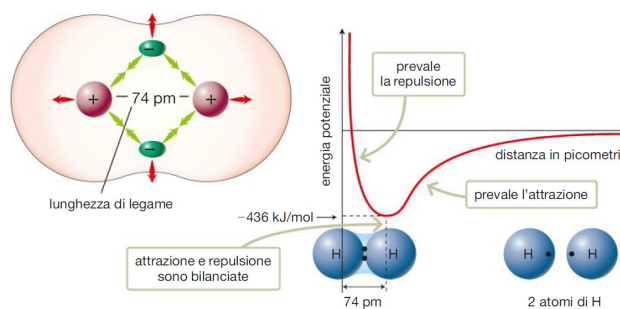
I legami covalenti sono responsabili della formazione delle molecole e la regola dell'ottetto ci permette spesso di prevedere la loro formula chimica. Molte proprietà delle sostanze dipendono non solo dalla particolare combinazione di determinati atomi e dal loro numero, ma anche da come questi si dispongono nello spazio.

Per descrivere la forma delle molecole vanno definiti alcuni parametri: la lunghezza del legame e l'angolo di legame.

Un ruolo importante è esplicitato dagli **angoli di legame** e dalla **lunghezza dei legami**.

95

La forma delle molecole



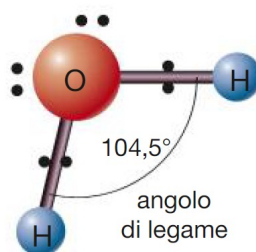
La lunghezza di legame è la distanza che intercorre tra i nuclei dei due atomi uniti da un legame covalente.

96

La forma delle molecole

L'**angolo di legame** è l'angolo formato dagli assi che congiungono i nuclei degli atomi legati.

Nella molecola d'acqua i legami formano un angolo di $104,5^\circ$. Le coppie elettroniche libere intorno all'atomo centrale sono dette **coppie solitarie**.



97

La teoria VSEPR

Ronald Gillespie nel 1957 mise a punto la teoria **VSEPR** (*Valence Shell Electron-Pair Repulsion*), detta teoria della repulsione delle coppie di elettroni del guscio di valenza, teoria che consente di affrontare la geometria molecolare:

- gli atomi in una molecola si dispongono in base al numero di coppie di elettroniche di valenza che circondano l'atomo centrale
- le coppie elettroniche si collocano il più lontano possibile tra loro

98

La teoria VSEPR

La teoria VSEPR ci permette di determinare la geometria della gran parte delle molecole in base al numero delle coppie elettroniche intorno all'atomo centrale:

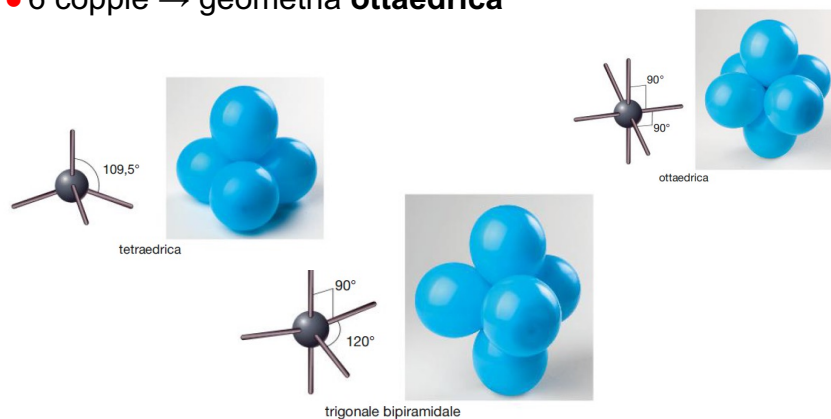
- 2 coppie → geometria **lineare**
- 3 coppie → geometria **triangolare planare**



99

La teoria VSEPR

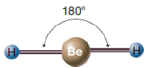
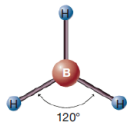
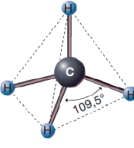
- 4 coppie → geometria **tetraedrica**
- 5 coppie → geometria **trigonale bipiramidale**
- 6 coppie → geometria **ottaedrica**



100

La teoria VSEPR

La forma di alcune molecole in cui l'atomo centrale ha tutti gli elettroni di valenza impegnati in legami.

Molecola	Struttura di Lewis	Forma	Struttura geometrica	Angolo di legame	Modello
BeH ₂	$\text{H} \cdot \uparrow \text{Be} \cdot \uparrow \text{H}$	lineare	$\text{H} - \text{Be} - \text{H}$	180°	
BH ₃	$\begin{array}{c} \text{H} \cdot \uparrow \text{B} \cdot \uparrow \text{H} \\ \cdot \cdot \\ \text{H} \end{array}$	triangolare planare	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H} - \text{B} - \text{H} \end{array}$	120°	
CH ₄	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \cdot \cdot \\ \text{H} : \text{C} : \text{H} \\ \cdot \cdot \\ \text{H} \end{array}$	tetraedrica	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H} - \text{C} - \text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	109,5°	

101

La teoria VSEPR

La repulsione tra due **coppie elettroniche libere** è maggiore della repulsione tra una coppia di elettroni liberi e una condivisa, che è a sua volta maggiore della repulsione tra due coppie di elettroni condivisi.

Le molecole con coppie di elettroni liberi sull'atomo centrale, quindi, hanno *angoli di legame diversi* dalle molecole in cui l'atomo centrale è circondato esclusivamente da doppietti elettronici di legame.

102

La teoria VSEPR

La forma di alcune molecole con coppie di elettroni liberi sull' atomo centrale.

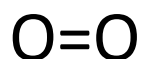
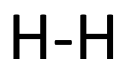
Molecola	Struttura di Lewis	Forma	Struttura geometrica	Angolo di legame	Modello
NH ₃		piramidale triangolare		107,3°	
H ₂ O		piegata		104,5°	

103

Molecole polari e non polari

La **polarità** di una molecola dipende sia dalla presenza di legami covalenti polari fra gli atomi che la compongono che dalla sua forma.

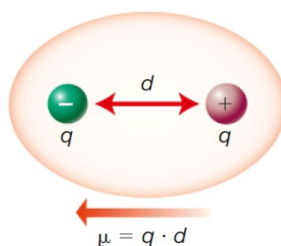
Una molecola che presenta legami covalenti puri, qualunque sia la sua forma, è una molecola **apolare**.



104

Molecole polari e non polari

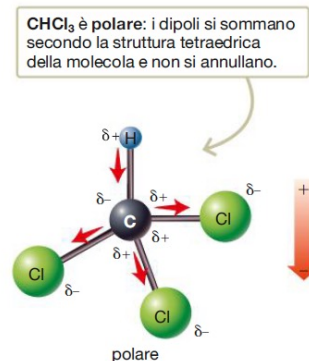
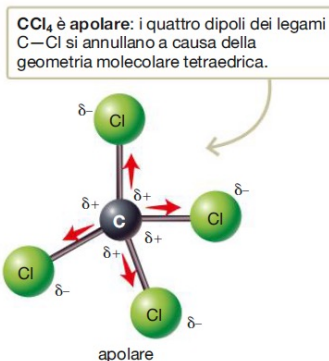
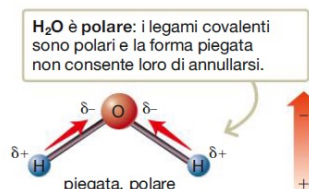
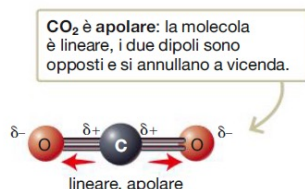
Un dipolo elettrico è caratterizzato dal suo **momento dipolare**, μ , una grandezza vettoriale che è tanto maggiore quanto più grandi sono le cariche parziali q e la loro distanza d . La sua unità di misura è il *debye* (D).



Una molecola è **polare** se la somma dei momenti dipolari dei suoi legami è diversa da zero.

105

Molecole polari e non polari



106

Molecole polari e non polari

Il simile scioglie il simile:

- **solventi non polari** (benzina, tetracloruro di carbonio, cherosene) → sciolgono molecole non polari
- **solventi polari** (acqua, alcol, acetone) → sciolgono molecole polari.

107

Le forze intermolecolari

Tra una molecola e l'altra agiscono forze di coesione che le mantengono vicine nello spazio vuoto. Tali forze sono chiamate interazioni intermolecolari e sono classificate in diverse categorie:

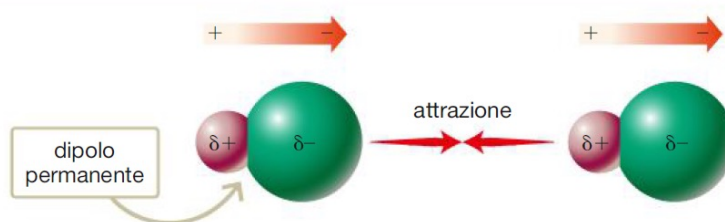
- **Forze dipolo-dipolo**
- **Forze di London**
- **Legame a Idrogeno**

108

Le forze intermolecolari

I legami elettrostatici tra dipoli permanenti (molecole polari) sono chiamati **forze dipolo-dipolo**.

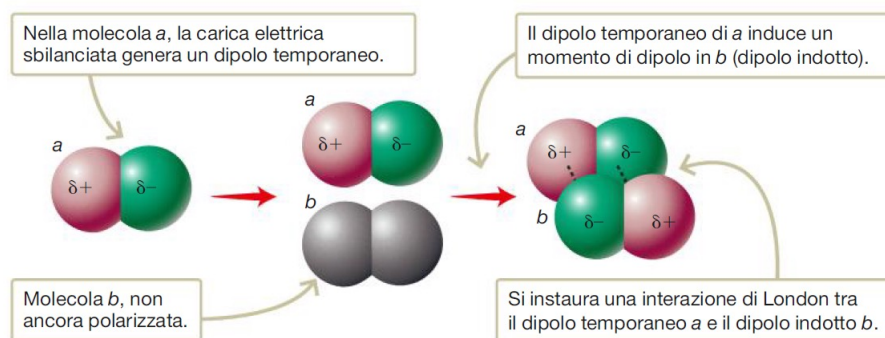
Sono interazioni deboli, di natura elettrostatica, *a corto raggio*, cioè significative solo a brevi distanze.



109

Le forze intermolecolari

I legami elettrostatici tra dipoli temporanei (molecole apolari) sono chiamati **forze di London**.



110

Le forze intermolecolari

I legami elettrostatici tra dipoli permanenti o temporanei sono chiamati **forze o interazioni di van der Waals**.

Sono circa 50 volte più deboli del legame covalente e aumentano al crescere della dimensione e della massa delle molecole.

Alogeno	t_{eb} (°C)	Massa molecolare (MM)	Numero elettroni
F ₂	-188,0	38	18
Cl ₂	-34,5	70,90	34
Br ₂	58,8	159,82	70
I ₂	185,2	253,8	106

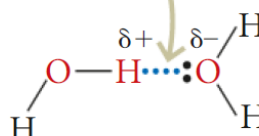
111

Le forze intermolecolari

Il **legame ad idrogeno** è una particolare forza dipolo-dipolo che si forma tra molecole:

- con un atomo di idrogeno legato in modo covalente a un atomo piccolo e molto elettronegativo (N, O, F)
- in cui l'atomo piccolo e molto elettronegativo ha almeno una coppia elettronica libera.

L'atomo di idrogeno fa da ponte tra due atomi di ossigeno.



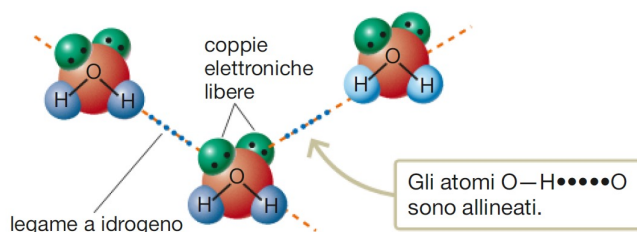
112

Le forze intermolecolari

Il legame ad idrogeno è una forza attrattiva che si stabilisce tra molecole che contengono un atomo di idrogeno legato covalentemente a un atomo piccolo, molto elettronegativo e con una coppia elettronica libera (N, O, F).

Per formare un legame ad idrogeno, i due atomi elettronegativi e l'idrogeno che fa da ponte devono essere tutti allineati. Le molecole quindi devono distanziarsi.

Nell'acqua allo stato solido le molecole sono bloccate in questa geometria e restano molti spazi vuoti. È per questo che il ghiaccio ha un volume maggiore e una densità minore dell'acqua liquida.

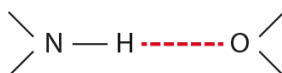
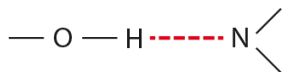
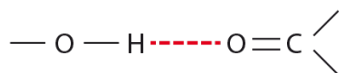
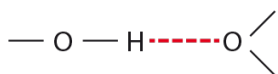


113

Le forze intermolecolari

Principali tipi di legami ad idrogeno

donatore accettore



114

Le forze intermolecolari

CLASSIFICAZIONE DEI LEGAMI CHIMICI

- LEGAME IONICO
- LEGAME COVALENTE → Legami forti
- LEGAME METALLICO

FORZA DEI LEGAMI MOLECULARI

- LEGAME A IDROGENO
- INTERAZIONI DI VAN DER WAALS
- INTERAZIONI DIPOLO-DIPOLO → Legami deboli

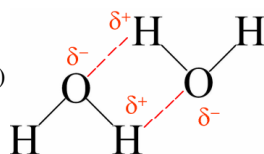
INTERAZIONI FORTI: 10-100 kcal/mole

- 1) LEGAME IONICO
- 2) LEGAME COVALENTE
- 3) LEGAME DATIVO (in presenza di un doppietto elettronico)

INTERAZIONI DEBOLI: 1-10 kcal/mole

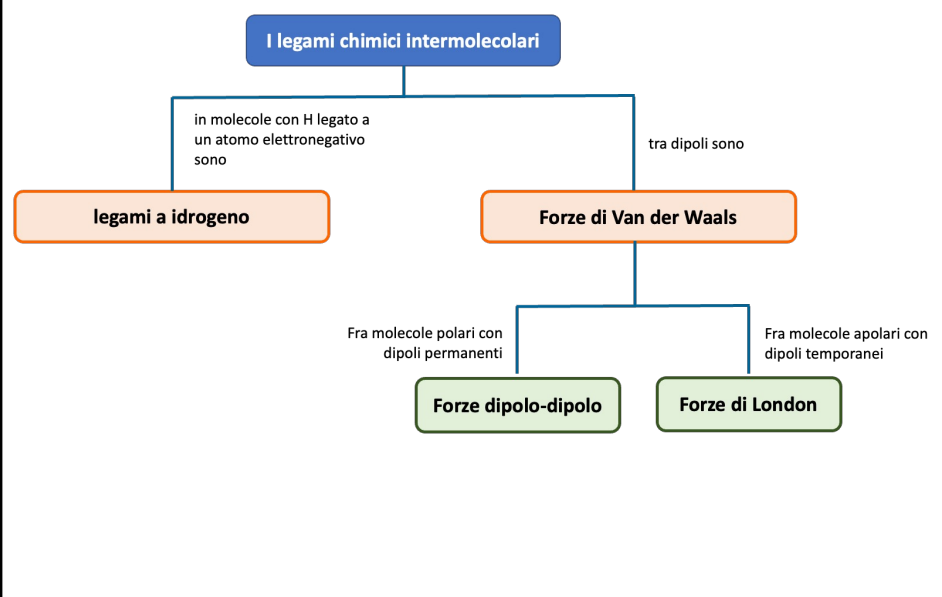
- 1) van der Waals (tra dipoli indotti)

- 2) Legame idrogeno: (tra dipoli permanenti)

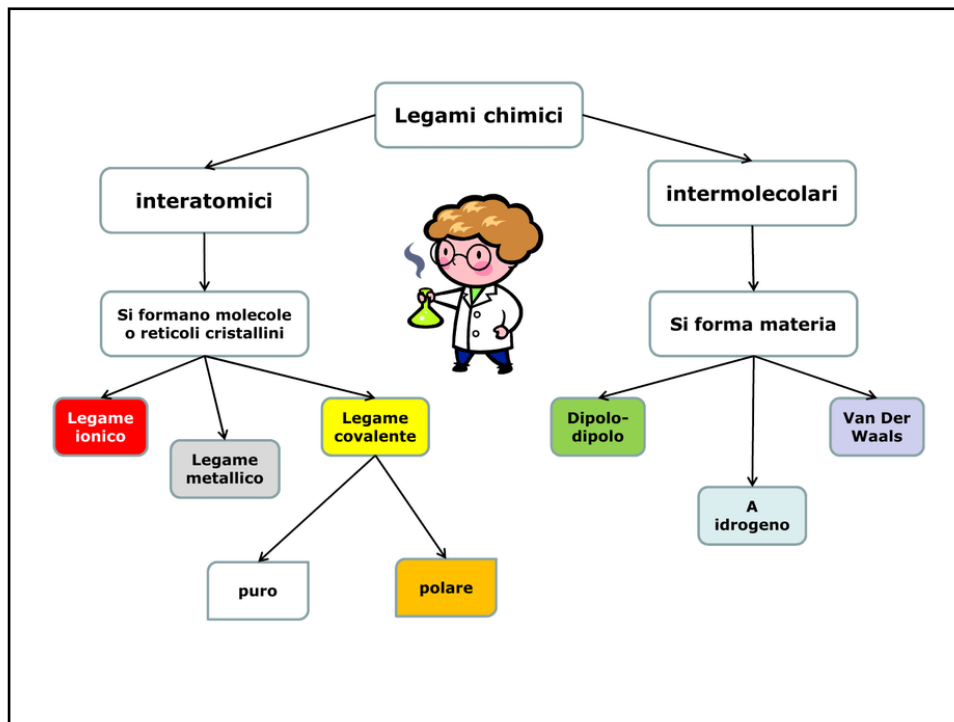


115

Le forze intermolecolari



116



117