



Scuola di Ingegneria Industriale e dell'Informazione  
Insegnamento di **Chimica Generale**  
083424 - CCS *CHI* e *MAT*

 POLITECNICO DI MILANO



## Il Legame Chimico (cap. 7)

Prof. Attilio Citterio

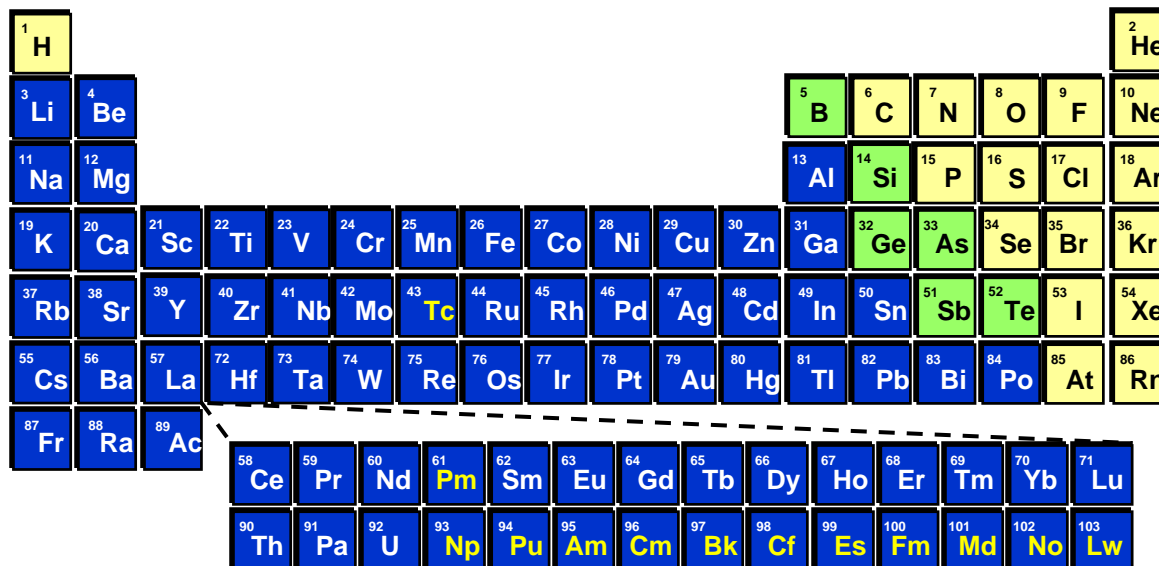
Dipartimento CMIC "Giulio Natta"

<http://iscamap.chem.polimi.it/citterio/it/education/general-chemistry-lessons/>



# Confronto Generale tra Elementi Metallici e Non-metallici

- Metalli
- Nonmetalli
- Metalloidi



PROPRIETA'	ATOMO METALLICO	ATOMO NONMETALLICO
Dimensione	Più grosso	Più piccolo
$Z_{eff}$	Più basso	Più alto
IP	Più basso	Più alto
EA	Più basso	Più alto

Ⓐ Valori relativi delle proprietà atomiche lungo i periodi

**Metalli: Elementi con IP < 9 eV**



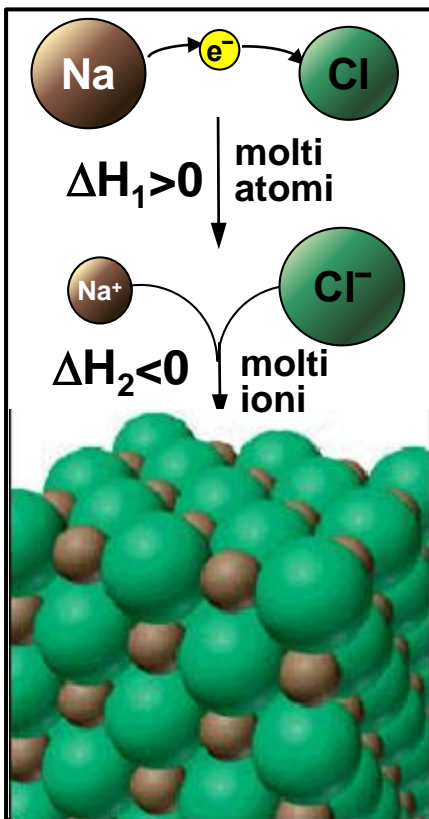
## I Tre Modelli di Legame Chimico

1. **Trasferimento di Elettroni e legame ionico**: si verifica tra atomi con una grossa differenza nella tendenza ad acquistare o perdere elettroni. I metalli cedono elettroni a non-metalli, ioni di carica opposta si attraggono per formare un esteso reticolo.
2. **Condivisione di elettroni e legame covalente**: si verifica tra atomi con una piccola differenza nella tendenza ad acquistare o perdere elettroni – normalmente tra due nonmetalli. Ciascun atomo trattiene i suoi elettroni di valenza e ne attrae un altro.
3. **Accumulo di elettroni e legame metallico**. Gli elettroni esterni sono schermati da quelli interni. Tutti gli atomi condividono i loro elettroni in un mare che fluttua attorno agli ioni metallici (nucleo + elettroni interni). Gli elettroni nel legame metallico sono delocalizzati.



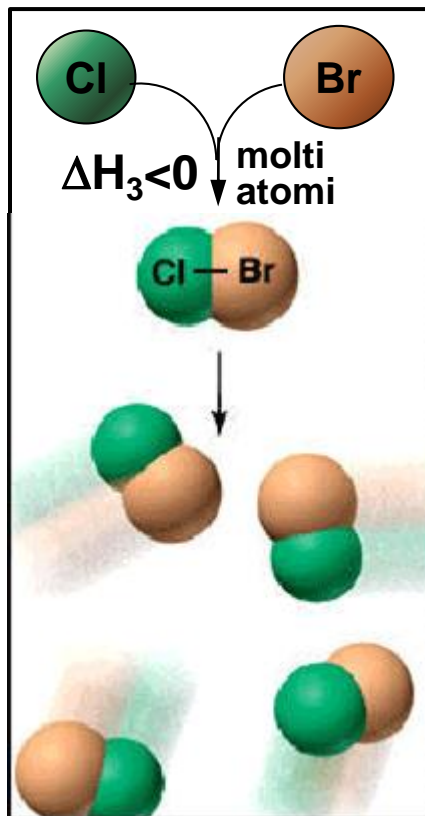
# I Tre Modelli di Legame Chimico

$$\Delta\chi > 2.0$$



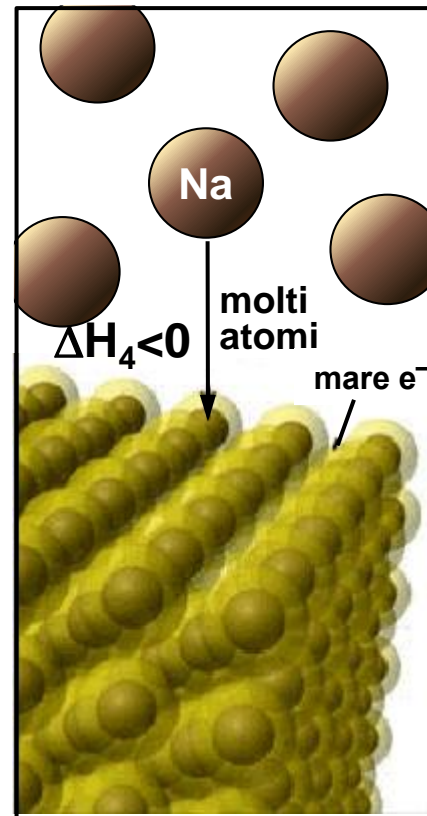
**A Legame ionico**

$$0.0 < \Delta\chi < 1.9$$



**B Legame covalente  
o covalente polare**

$$IP < 9 \text{ eV}$$



**C Legame metallico**



# Formule di Lewis (Punto-Elettrone) per gli Elementi del 2° e 3° Periodo

Periodo	1A(1)	2A(2)	3A(13)	4A(14)	5A(15)	6A(16)	7A(17)	8A(18)
	$ns^1$	$ns^2$	$ns^2np^1$	$ns^2np^2$	$ns^2np^3$	$ns^2np^4$	$ns^2np^5$	$ns^2np^5$
2	• Li	• Be •	• B •	• C •	• N •	• O •	• F •	• Ne •
3	• Na	• Mg •	• Al •	• Si •	• P •	• S •	• Cl •	• Ar •

Nella struttura a punti (elettroni), i punti attorno al simbolo rappresentano gli elettroni di valenza dell'atomo. Per tutti gli elementi dei gruppi principali:

1. Prendere il numero del gruppo A, che dà il N° di elettroni di valenza.
2. Disporre 1 punto alla volta sui quattro lati del simbolo.
3. Appaiare i punti fino ad esaurirli tutti.



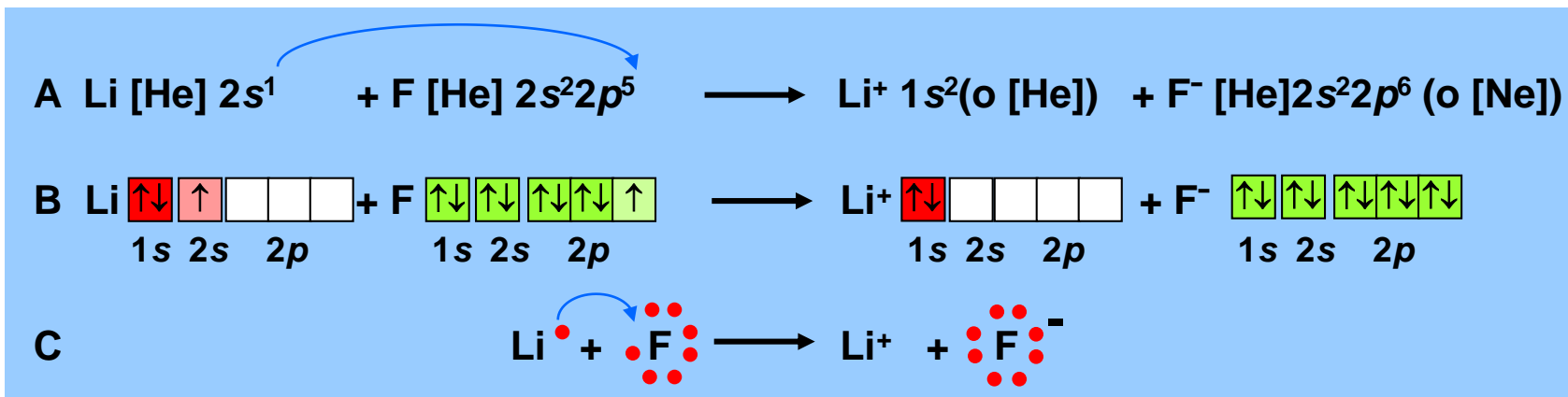
1. Per un metallo, il numero totale di punti è il numero di elettroni che l'atomo perde nel formare un catione.
2. Per un nonmetallo, il numero di punti spaiati è il numero di elettroni che si appaiano per acquisto o condivisione di elettroni.
3. Il numero di punti spaiati uguaglia o la carica negativa dell'anione dell'atomo o il numero di legami covalenti che questo forma.

## Legame Ionico e Regola dell'Ottetto

**Regola dell'Ottetto** : Quando gli atomi si legano, perdono, acquistano o condividono elettroni per raggiungere uno strato esterno di 8 elettroni.  
La **regola funziona** per elementi del 2° periodo e per una gran parte degli altri **in composti semplici**.

Gli atomi tendono a perdere o acquistare elettroni per assumere la configurazione del gas nobile più vicino.

### Formazione di $\text{Li}^+$ e $\text{F}^-$ per Trasferimento Elettronico

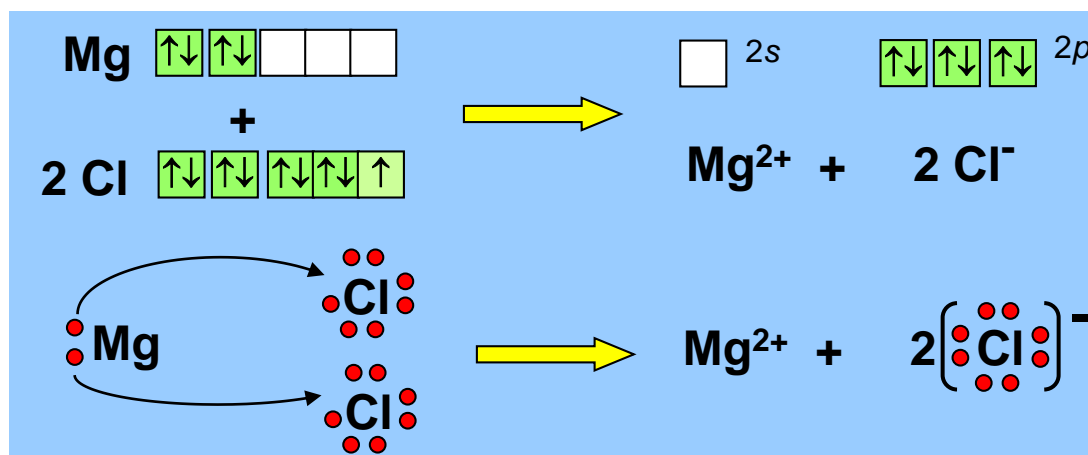




**Problema:** Utilizzare i diagrammi orbitalici a celle e le strutture di Lewis per rappresentare la formazione degli ioni magnesio e cloruro a partire dai rispettivi atomi, e determinare la formula del composto.

**Piano:** Disegnare i diagrammi orbitalici per Mg e Cl. Per riempire i livelli esterni il Mg perde 2 elettroni, e il Cl acquista 1 elettrone.

Perciò, è richiesto l'impiego di due atomi di Cl per ogni atomo di Mg.



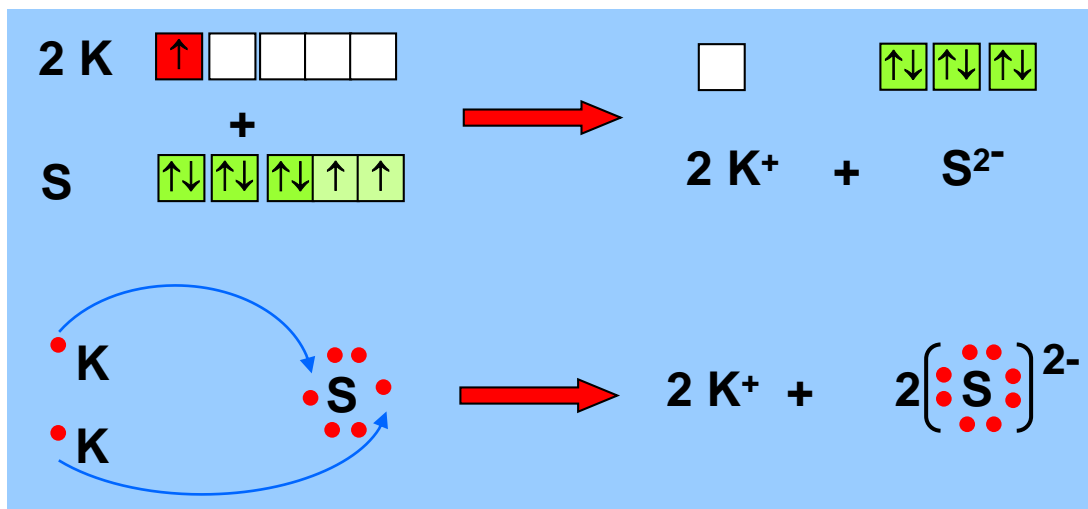




**Problema:** Utilizzare i diagrammi orbitalici a riquadri e le strutture di Lewis per rappresentare la formazione degli ioni potassio e zolfo dai rispettivi atomi, e determinare la formula del composto.

**Piano:** Disegnare i diagrammi orbitalici per K e S. Per riempire i livelli esterni lo zolfo acquista 2 elettroni e il K perde 1 elettrone.

**Soluzione:**





Formazione di LiF (s) dagli elementi:

1. Per far perdere 1 mole di elettroni ad 1 mole di atomi di Li serve un'energia pari al potenziale di 1<sup>a</sup> ionizzazione del Li ( $IE_1 = 520 \text{ kJ}$ ).
2. Per far acquistare 1 mole di elettroni ad 1 mole di atomi di F è necessaria un'energia pari all'affinità elettronica di F ( $EA = -328 \text{ kJ}$ ).

$$IE_1 + EA = 520 \text{ kJ} + (-328 \text{ kJ}) = 192 \text{ kJ}$$

La formazione degli ioni isolati non è energeticamente favorevole!!!.

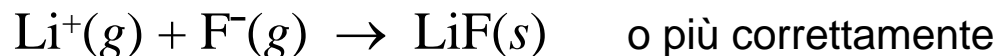
Al contrario un'elevata quantità di energia viene rilasciata quando gli ioni gassosi  $\text{Li}^+$  e  $\text{F}^-$  si combinano per formare il composto LiF in fase gassosa:





LiF non si trova a temperatura ambiente come molecola in fase gas. Esso esiste solo come *solido cristallino condensato*.

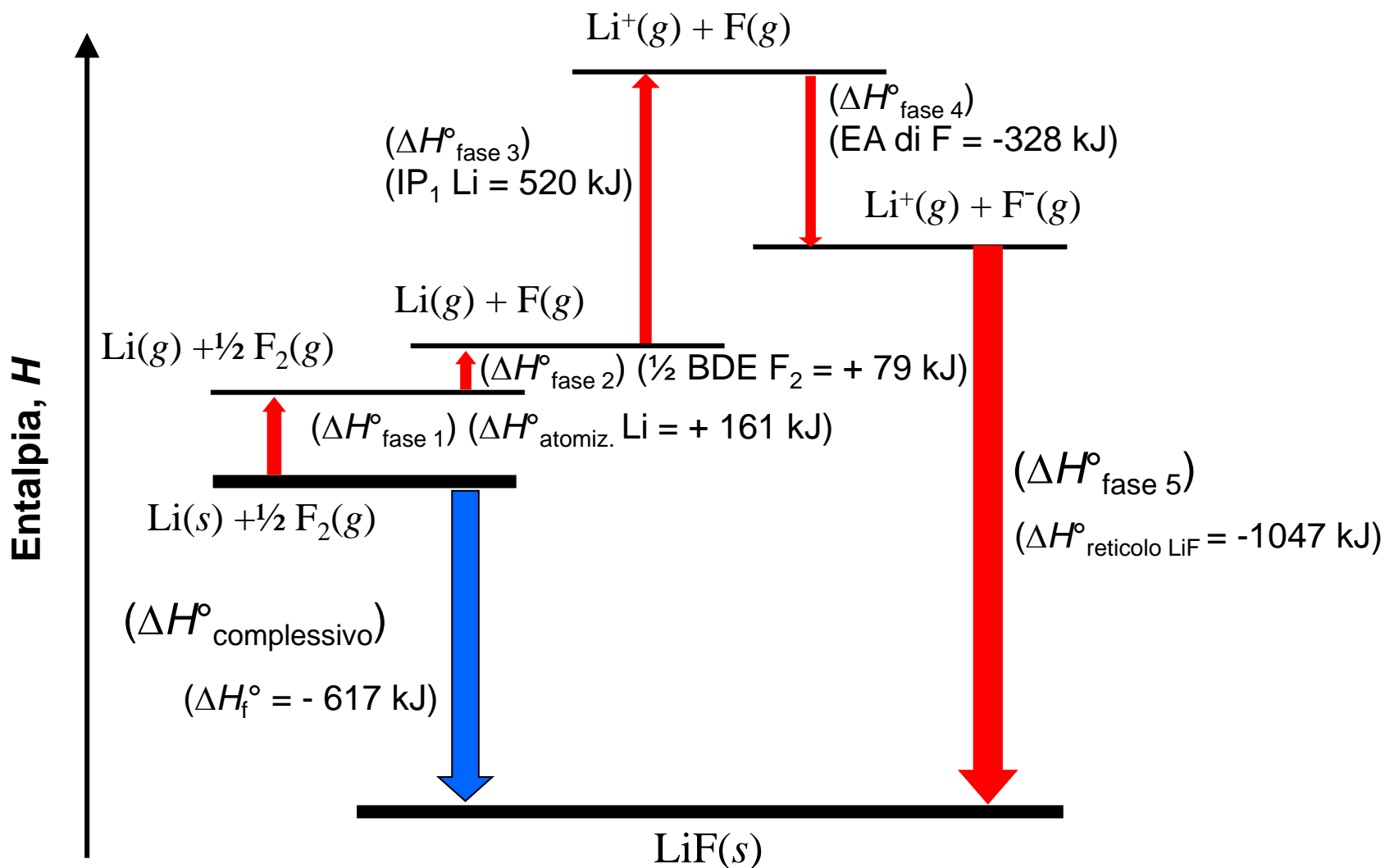
Una quantità di energia ancora più elevata viene rilasciata quando gli ioni gassosi si condensano organizzandosi nello stato solido:



*energia reticolare*

L'**energia reticolare** è l'entalpia rilasciata quando (secondo la stechiometria del composto ionico  $A_xB_y$ )  $x$  mole di ioni gassosi positivi si condensano con  $y$  moli di ioni gassosi negativi a dare una mole di solido ionico (reticolo perfetto). E' un esempio di energia di **polimerizzazione**.

# Ciclo di Born-Haber per la Formazione di LiF





Se si conosce la variazione di entalpia per la reazione di formazione:

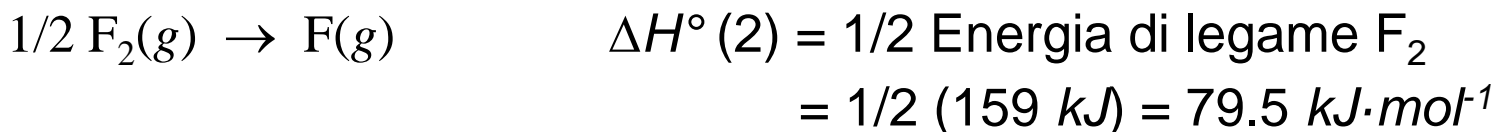


e sono note le variazioni di entalpia per ogni singola fase (1-4) nel ciclo di Born-Haber, si può calcolare l'energia reticolare.





(fase 2) Convertire  $\text{F}_2$  in 2 atomi di F



(fase 3) Allontanare l'elettrone 2s da Li a dare  $\text{Li}^+$



(fase 4) Aggiungere un elettrone a F per formare  $\text{F}^-$



(fase 5) Formazione del solido cristallino dagli ioni gassosi





## Risolvendo per l'Energia Reticolare

Ora sommando le energie per le fasi (1)-(5) si recupera la variazione di energia:

$$\begin{aligned}\Delta H_f^\circ &= 161 + 79.5 + 520 - 328 + \Delta H_{\text{LiF}}^\circ \\ &= -617 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}\end{aligned}$$

E risolvendo per l'energia reticolare (fase 5) dalla legge di Hess:

$$\Delta H_{\text{LiF}}^\circ = \Delta H_f - [\Delta H^\circ (1) + \Delta H^\circ (2) + \Delta H^\circ (3) + \Delta H^\circ (4)]$$

$$\Delta H_{\text{LiF}}^\circ = -617 - [161 + 79.5 + 520 + (-328)] \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

$$\Delta H_{\text{LiF}}^\circ = -1050 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$$

*L'energia reticolare rende possibile il trasferimento elettronico sfavorevole in fase gas!*



# Reazione di $\text{Br}_2(\text{l})$ e $\text{Na}(\text{s})$ a Formare $\text{NaBr}(\text{s})$



Gli Elementi

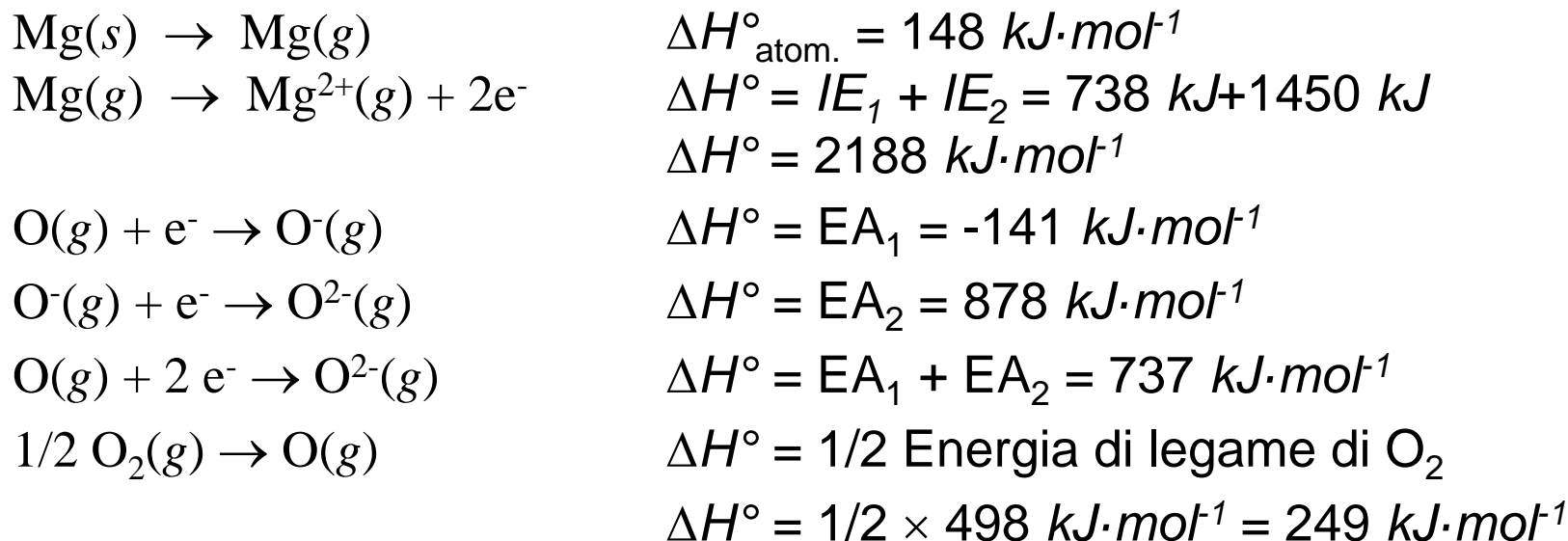


In Reazione!





## Energia Reticolare per MgO

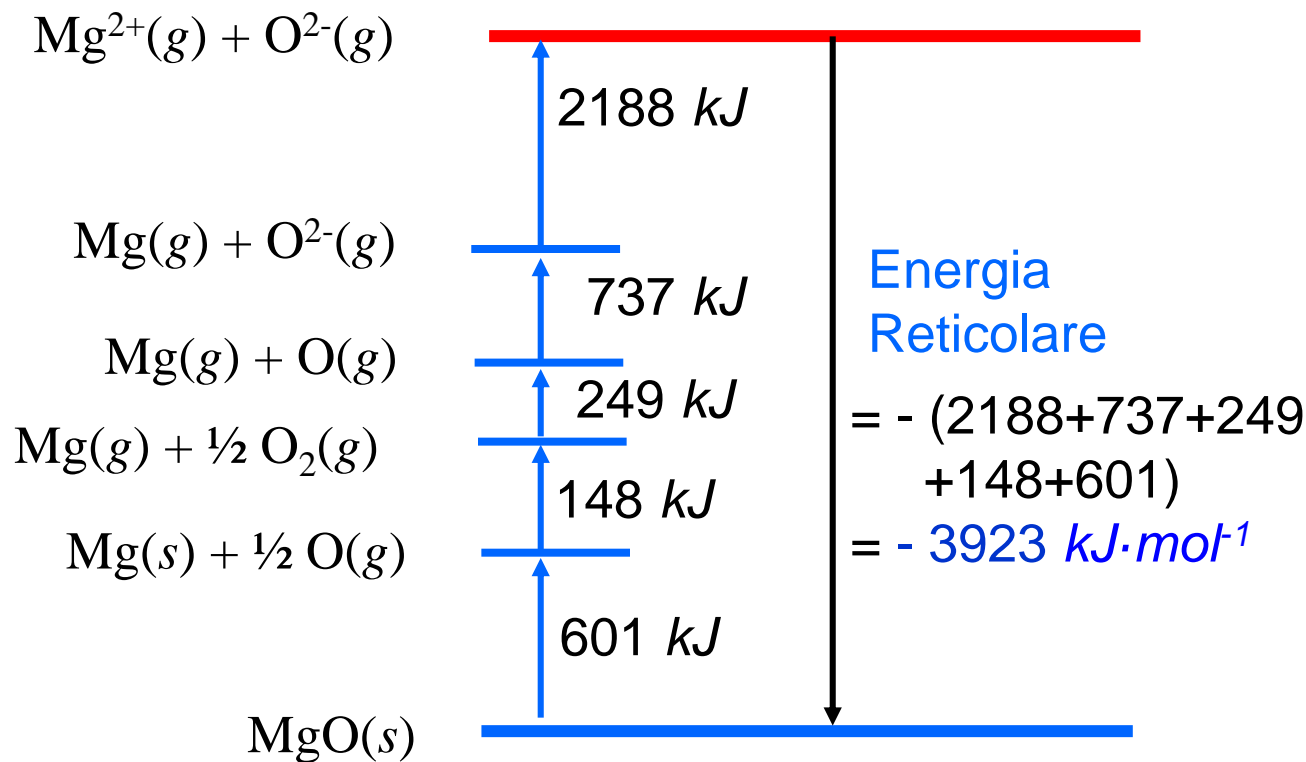


Benché le varie fasi siano endotermiche, la fase di formazione del reticolo (non riportata) con un  $\Delta H^\circ_{\text{MgO}} = -3923 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$  è così esotermica che la formazione complessiva di MgO è esotermica.

In effetti bruciando Mg all'aria,  $\Delta H^\circ_f$  di  $\text{MgO}(s) = -601 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ .

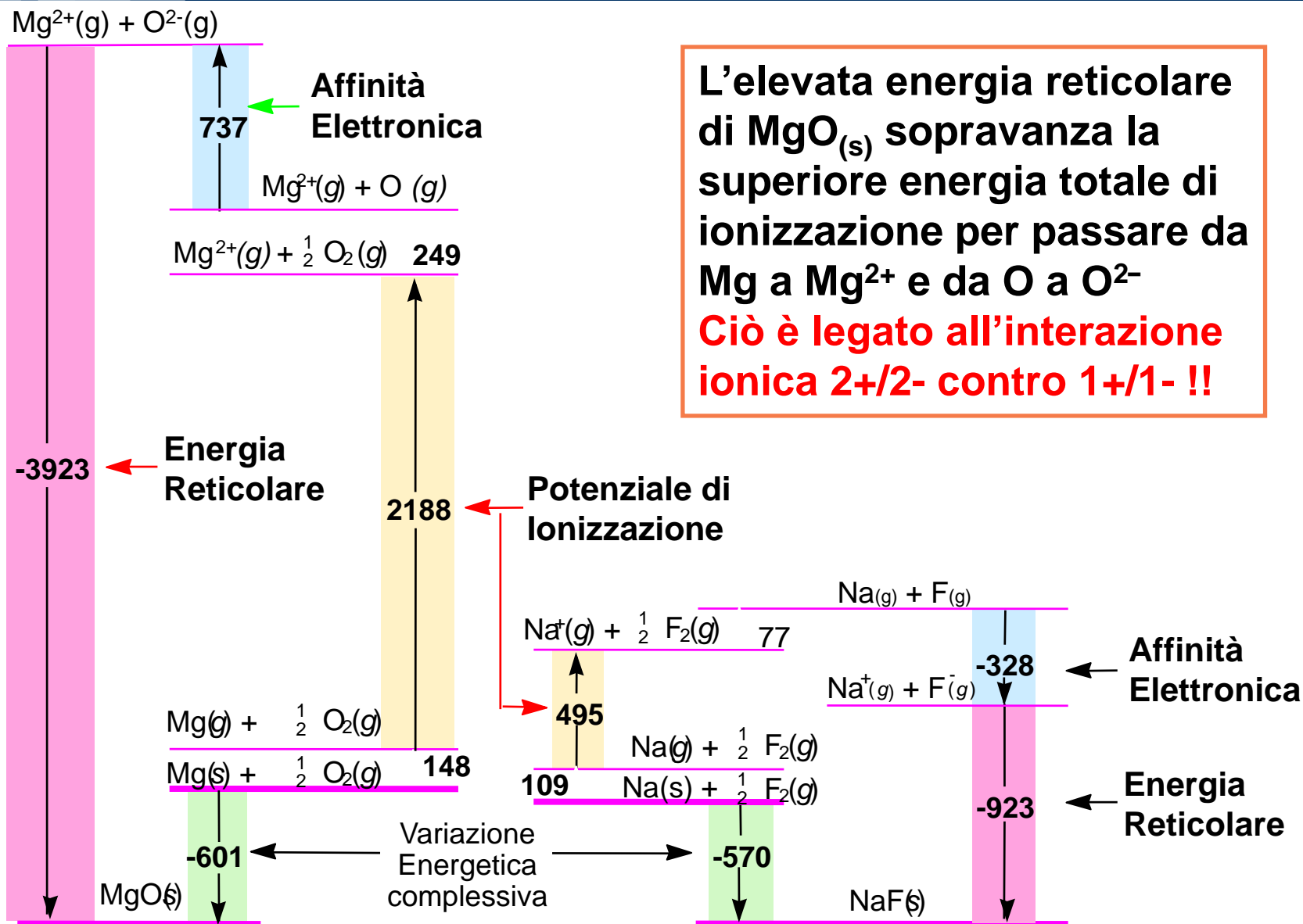


# Calcolo dell'Energia Reticolare di MgO dal Ciclo di Born-Haber





# Confronto tra l'Energetica della Formazione di MgO e NaF Solidi dagli Elementi



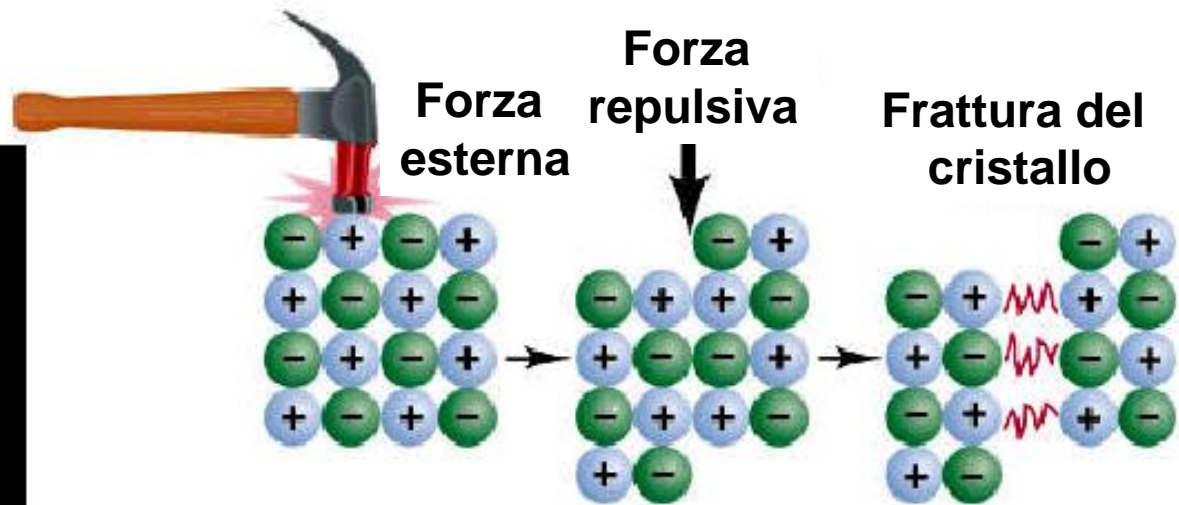


## Proprietà Fisiche dei Composti Ionici

1. I composti ionici sono:
  - a. Duri (non si incidono facilmente)
  - b. Rigidi (non si flettono)
  - c. Fragili (si rompono senza deformarsi)
  
2. Conducono l'elettricità in soluzioni acquose ma in stato solido sono generalmente buoni isolanti (*a bassa temperatura e quando gli ioni sono di dimensioni simili*).
  
3. Presentano elevate temperature di fusione. Si deve superare l'energia reticolare per formare le coppie ioniche (→ processo altamente endotermico). I composti ionici normalmente esistono in stato solido con cariche alternate positive e negative in reticoli di struttura spesso prevedibile.



A



B

## Legge di Coulomb

$$F = \frac{Q_1 \cdot Q_2}{r^2}$$

## Energia elettrostatica

$$E = \sum F \times r = M \frac{Q_1 \cdot Q_2}{r}$$

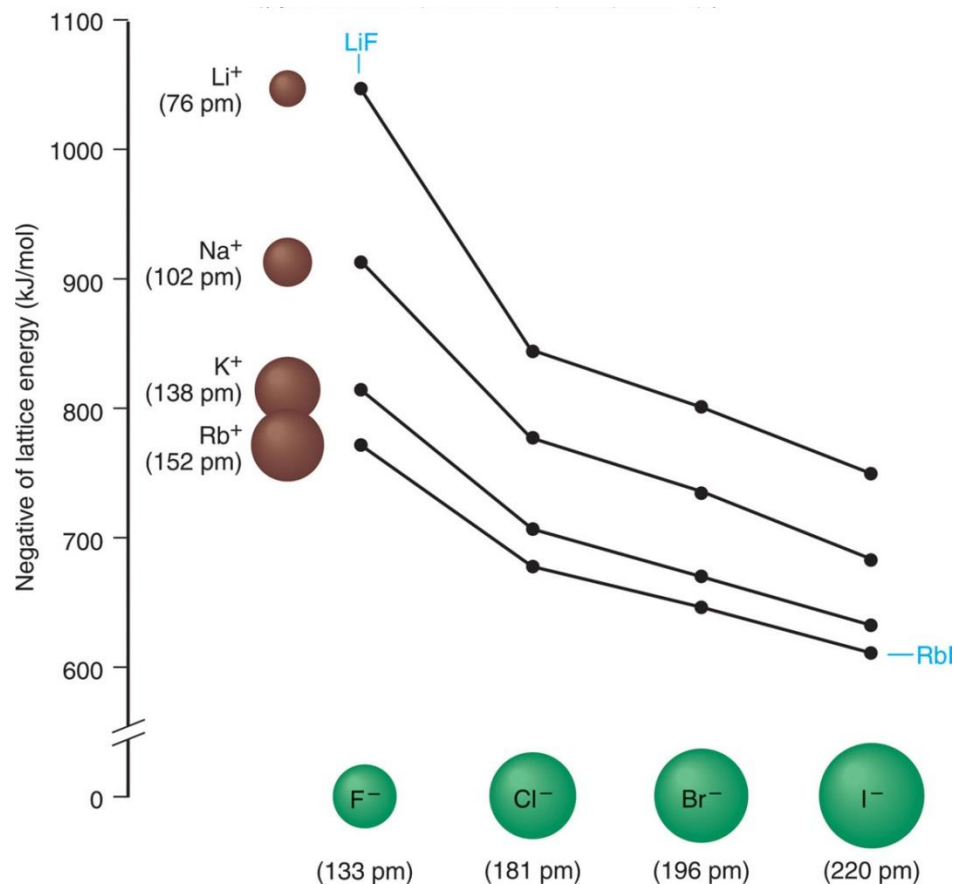
$\rightarrow \propto \Delta H^\circ_{\text{reticolare}}$

costante di  
proporzionalità M =  
Costante di Madelung



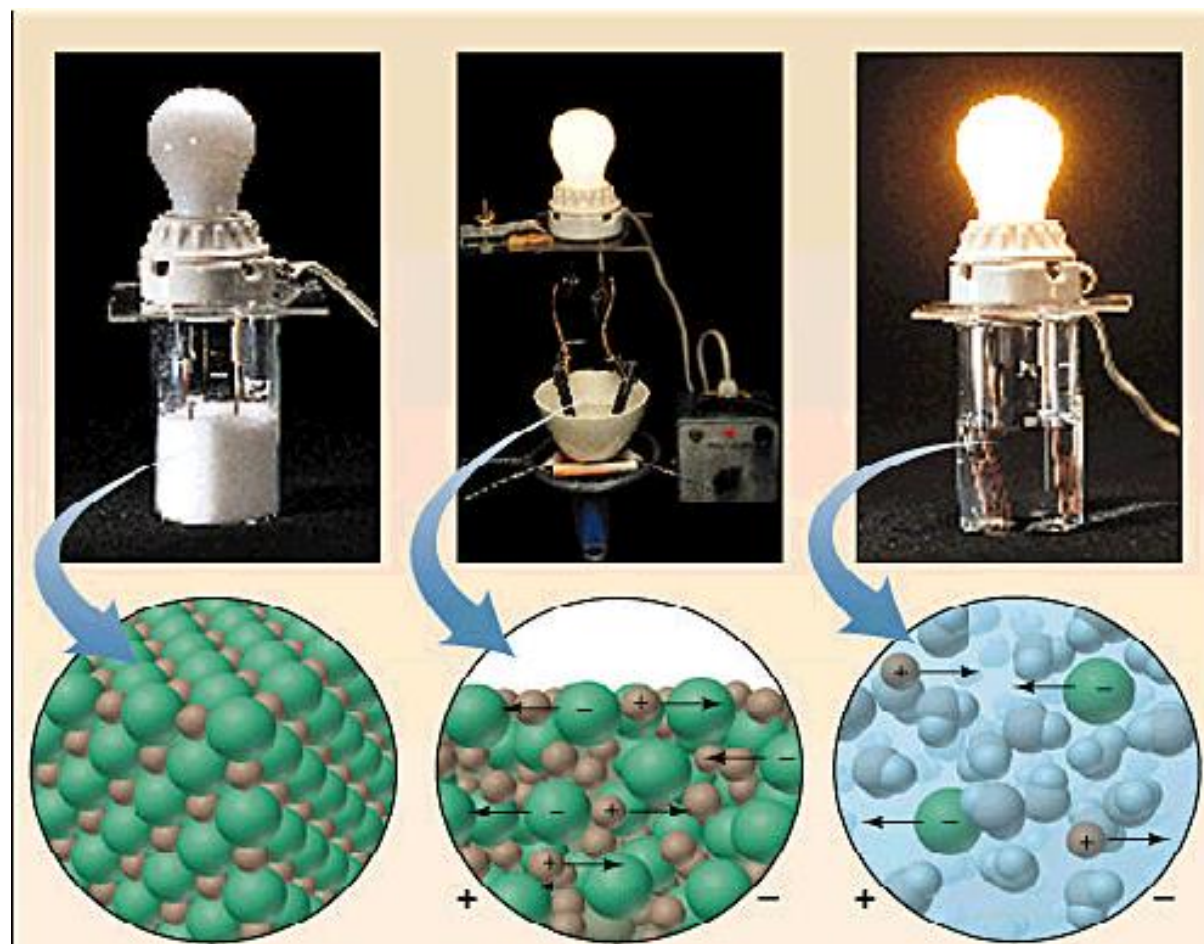
# Punti di Fusione (mp) e di Ebollizione (bp) di Alcuni Composti Ionici

Composto	<i>mp</i> (°C)	<i>bp</i> (°C)
CsBr	636	1300
NaI	661	1304
MgCl <sub>2</sub>	714	1412
KBr	734	1435
CaCl <sub>2</sub>	772	1935
NaCl	801	1413
LiF	845	1676
KF	858	1505
MgO	2852	3600



**Giustificare l'andamento sperimentale!**

# Conducibilità Elettrica di Composti Ionici



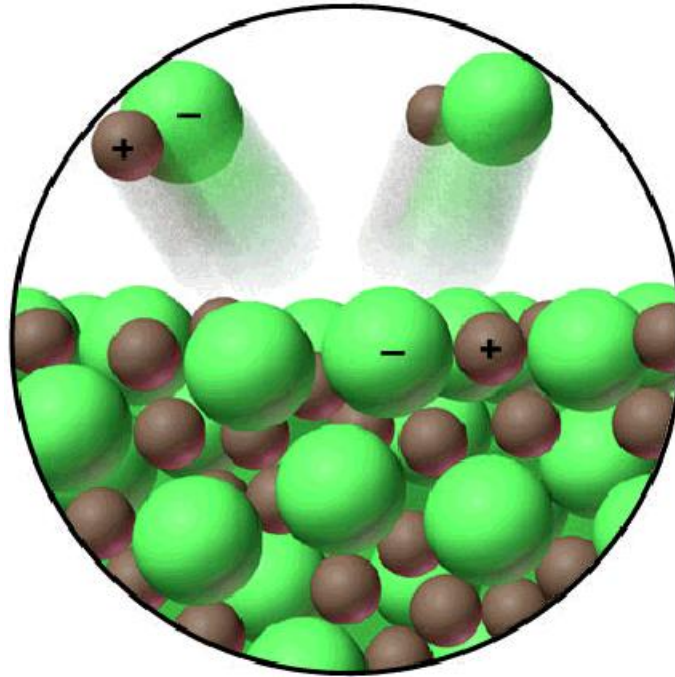
**A** Composto ionico solido

**B** Composto ionico fuso

**C** Composto ionico sciolto in acqua



## Gassificazione di un Composto Ionico



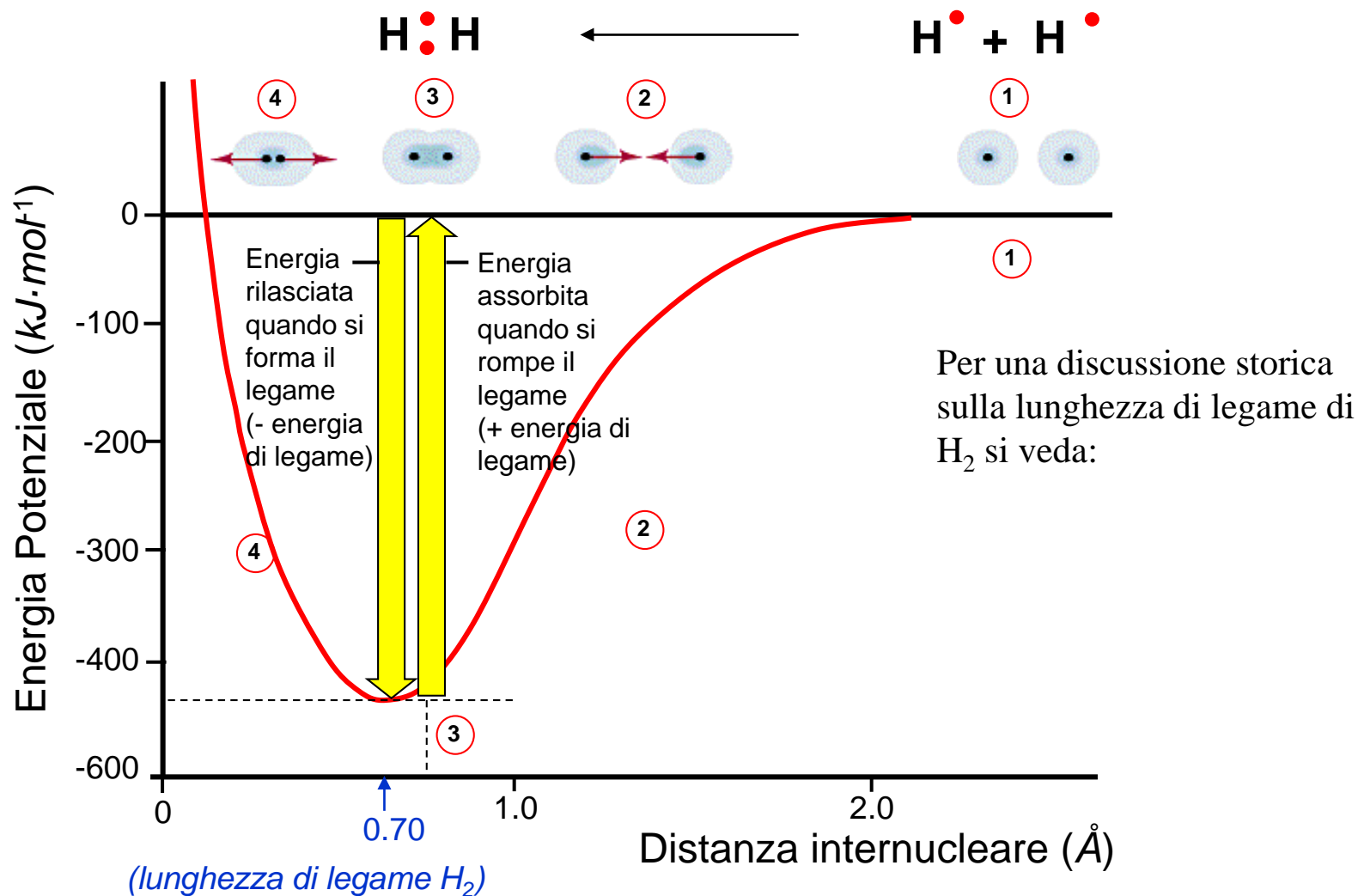
Il **gas** che sovrasta un **solido ionico** ad **alta temperatura** è costituito da **molecole** (coppie ioniche).

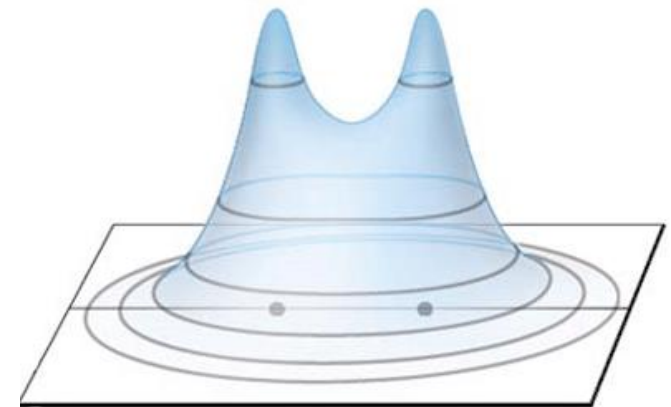
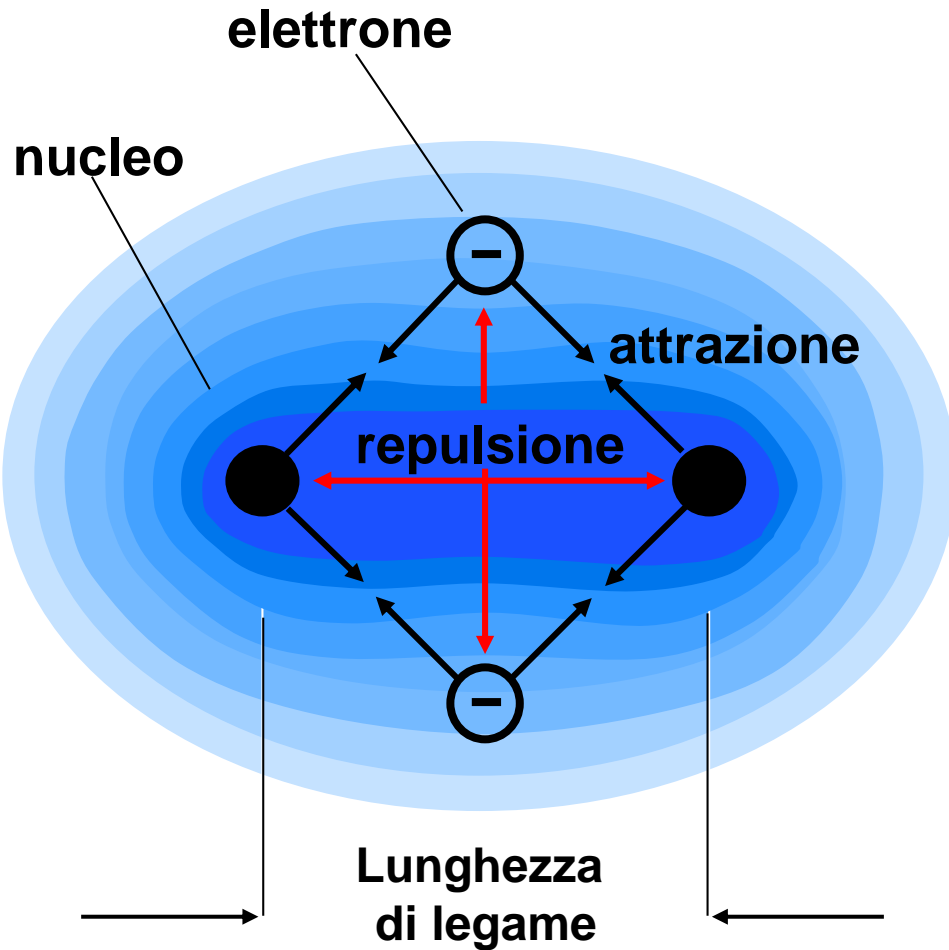




## ➤ **Il Modello del Legame Covalente**

# Legame Covalente nell'Idrogeno, H<sub>2</sub>







- Nel legame covalente, ciascun atomo raggiunge il riempimento del livello energetico condividendo gli elettroni. Pertanto si devono “contare” le coppie elettroniche condivise come se appartenessero totalmente agli atomi.
- La coppia elettronica condivisa è rappresentata da un coppia di punti o da una linea che stanno ad indicare il legame.



**Legame** (inglese: *Bond*)



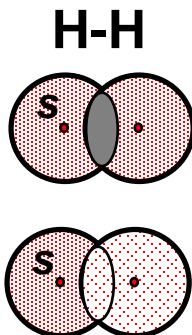
# O.M. Leganti ed Antileganti sigma: Ordine di Legame (OL)

$$\psi(\text{VB}) = \psi(1s)\text{A} + \psi(1s)\text{B}$$

(combinazione legante)

$$\psi^*(\text{VB}) = \psi(1s)\text{A} - \psi(1s)\text{B}$$

(combinazione antilegante)

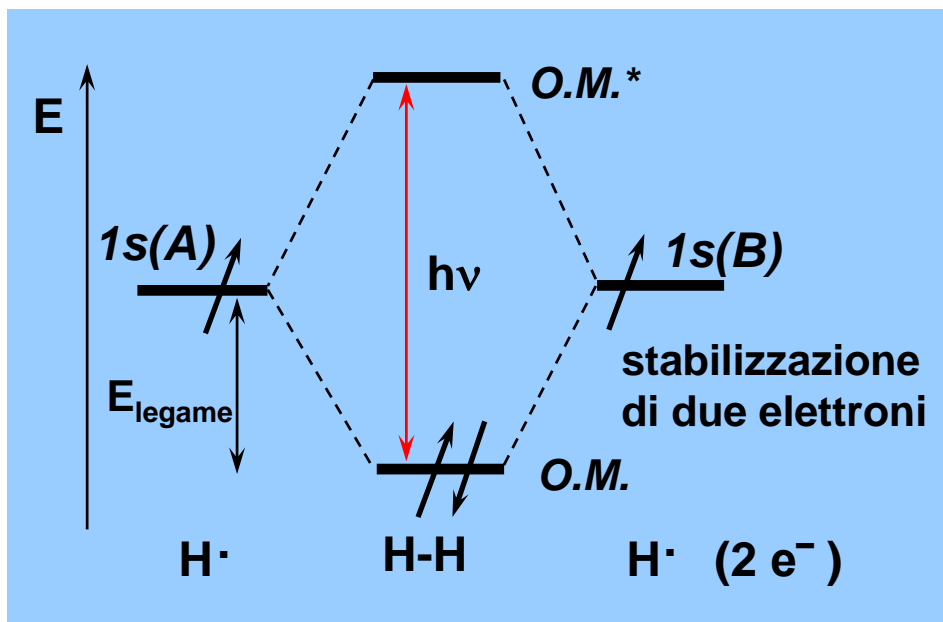


**Sovrapposizione in fase (costruttiva), d.e. aumenta**

$\sigma$  gerade

$\sigma^*$  ungerade

**Sovrapposizione fuori fase (distruttiva), nodo**



$$\text{OL} = (\text{N}^\circ \text{e}^- \text{OM}_{\text{leganti}} - \text{N}^\circ \text{e}^- \text{OM}_{\text{antileganti}})$$

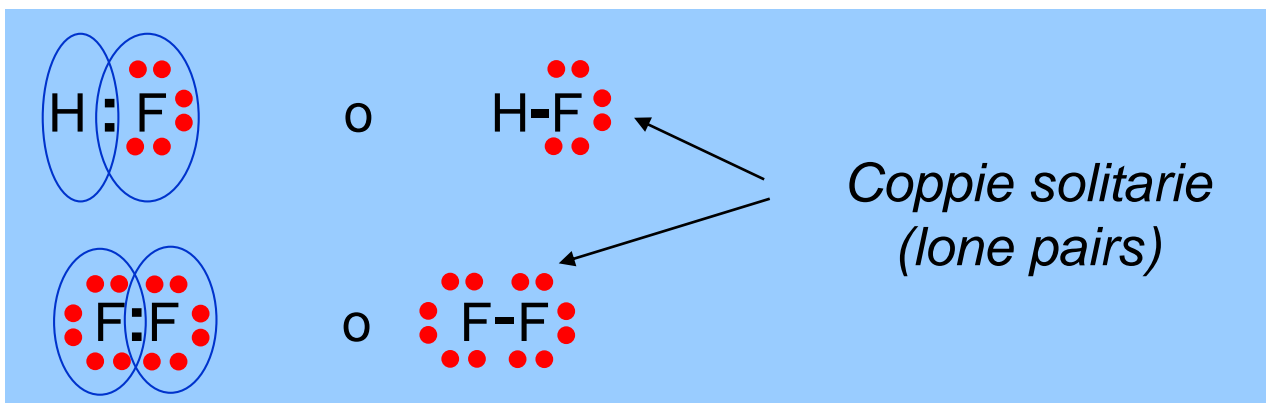
$$\text{OL} = (2 - 0)/2 = 1$$



# Rappresentazione di Lewis (Punti-Elettroni) del Legame Covalente

Una coppia elettronica che appartiene allo strato di valenza di un atomo ma non è implicata nel legame è detta “coppia solitaria (eng.: lone pair)”.

La coppia di legame in HF riempie lo strato esterno dell'atomo H e, assieme alle 3 coppie elettroniche sul F, riempie lo strato esterno dell'atomo F.





## Tipi di Legami e Ordine di Legame

***Ordine di Legame*** = N° di elettroni condivisi fra qualsiasi coppia di atomi legati diviso due.

Il legame covalente in  $H_2$ , HF e  $F_2$  è costituito da una singola coppia elettronica di legame.

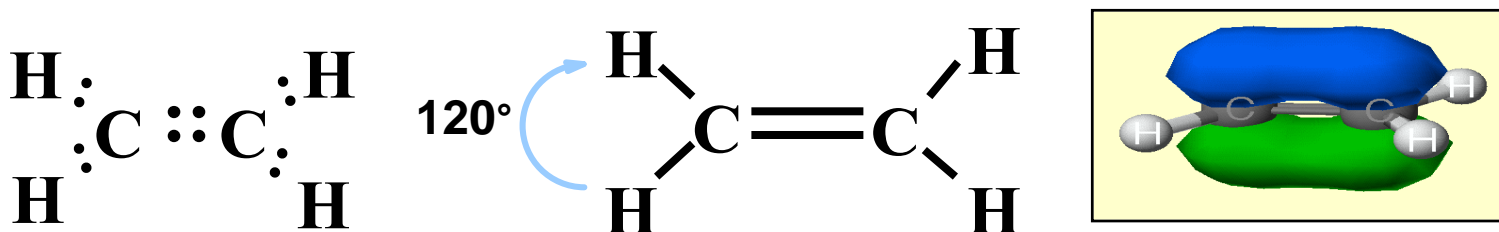
*Un legame singolo ha un ordine di legame di uno (O.L. = 1).*

I legami singoli sono molto comuni, ma molte molecole possiedono anche legami multipli (O.L. = 2, 3) e talvolta legami con ordine di legame frazionario (O.L. = 1/2, 2/3).

## Legami Multipli

**Legame multiplo:** due o più coppie elettroniche condivise tra due atomi legati tra loro covalentemente. I legami multipli si incontrano frequentemente tra atomi C, O, N, o S.

**Doppio legame:** due coppie di legame (4 elettroni in totale) condivisi tra i due atomi. L'ordine di legame è 2. I due legami hanno simmetria diversa.

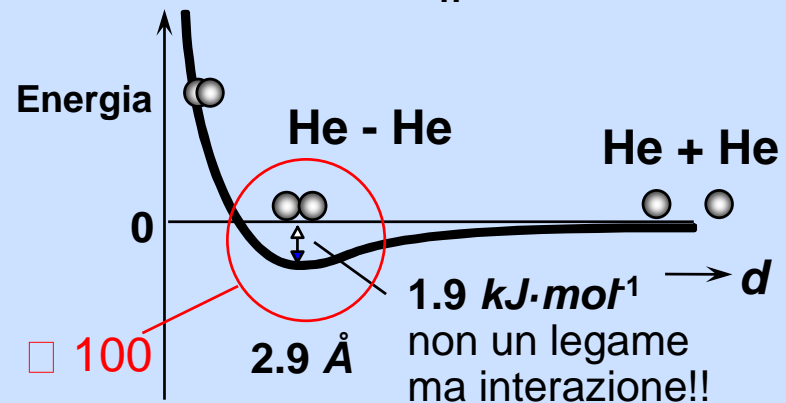
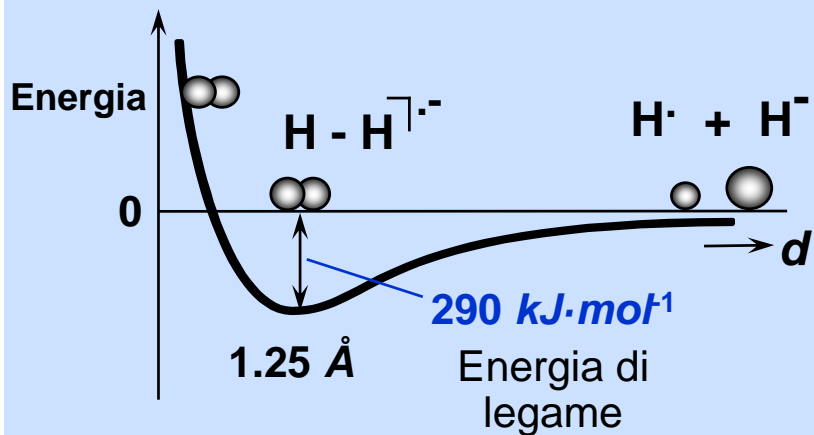
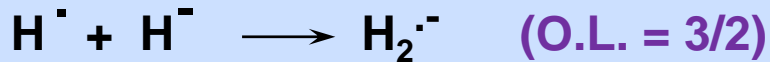
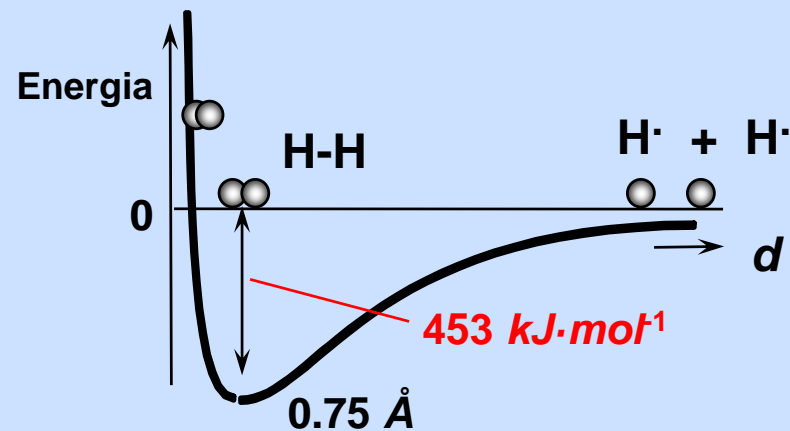
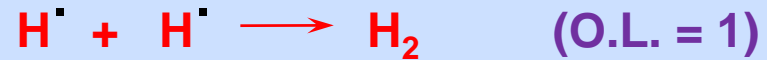
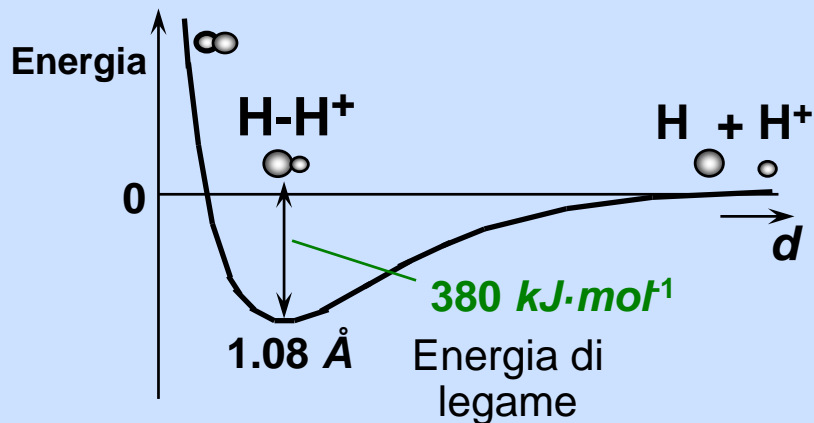


**Triplo legame:** è costituito da 3 coppie di legame, due atomi condividono 6 elettroni. L'ordine di legame è 3.



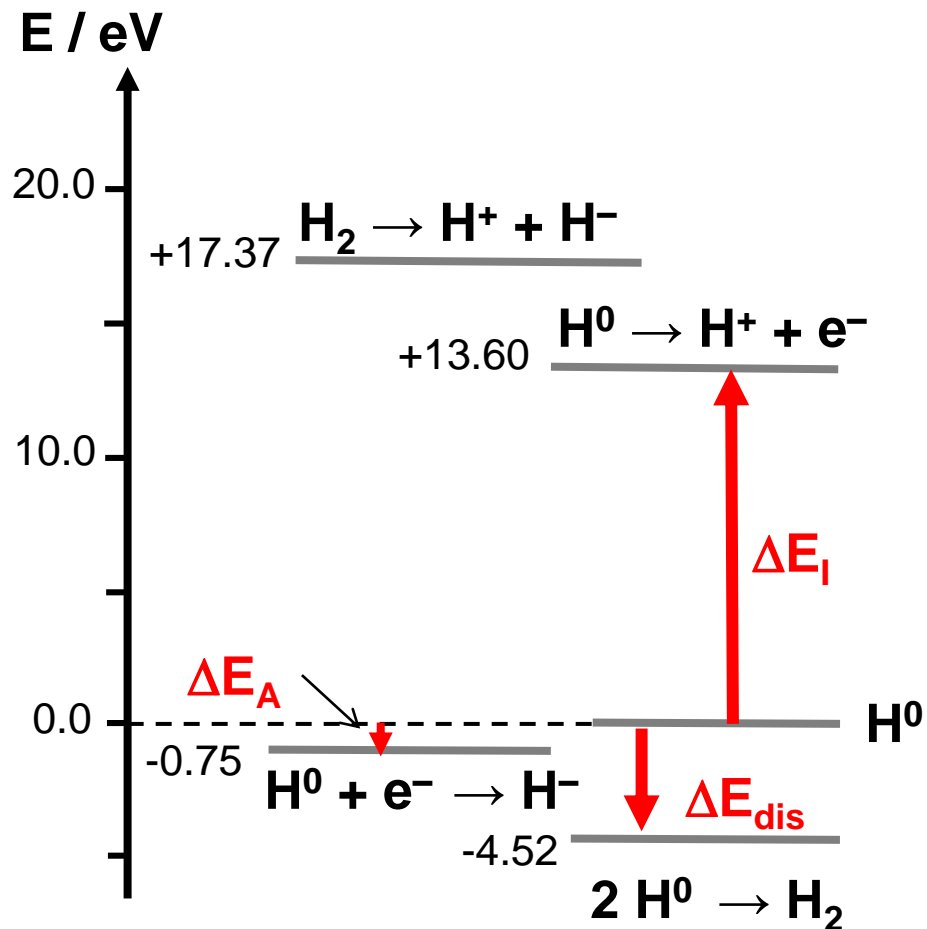


# Legami a 1, 2, 3 e ~~4~~ Elettroni





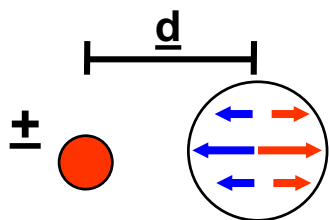
# I Diversi Stati dell'Idrogeno e le Corrispondenti Energie di Trasformazione





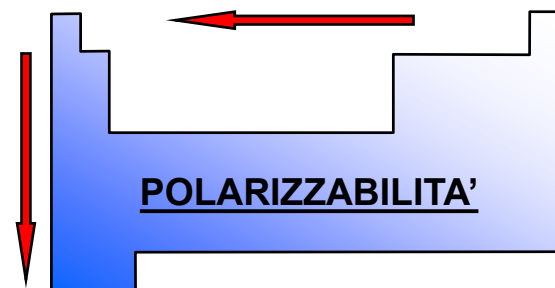
# Polarizzabilità

La Polarizzabilità ( $\alpha$ ) è la capacità di un atomo (o molecola) di deformare la distribuzione elettronica più esterna in presenza di un campo elettrico (generato da ioni o molecole polari).



$$E_{attr.} = -\frac{Z^2 \cdot \alpha \cdot e^2}{2r^2} \propto \frac{1}{r^4}$$

## Andamenti Periodici

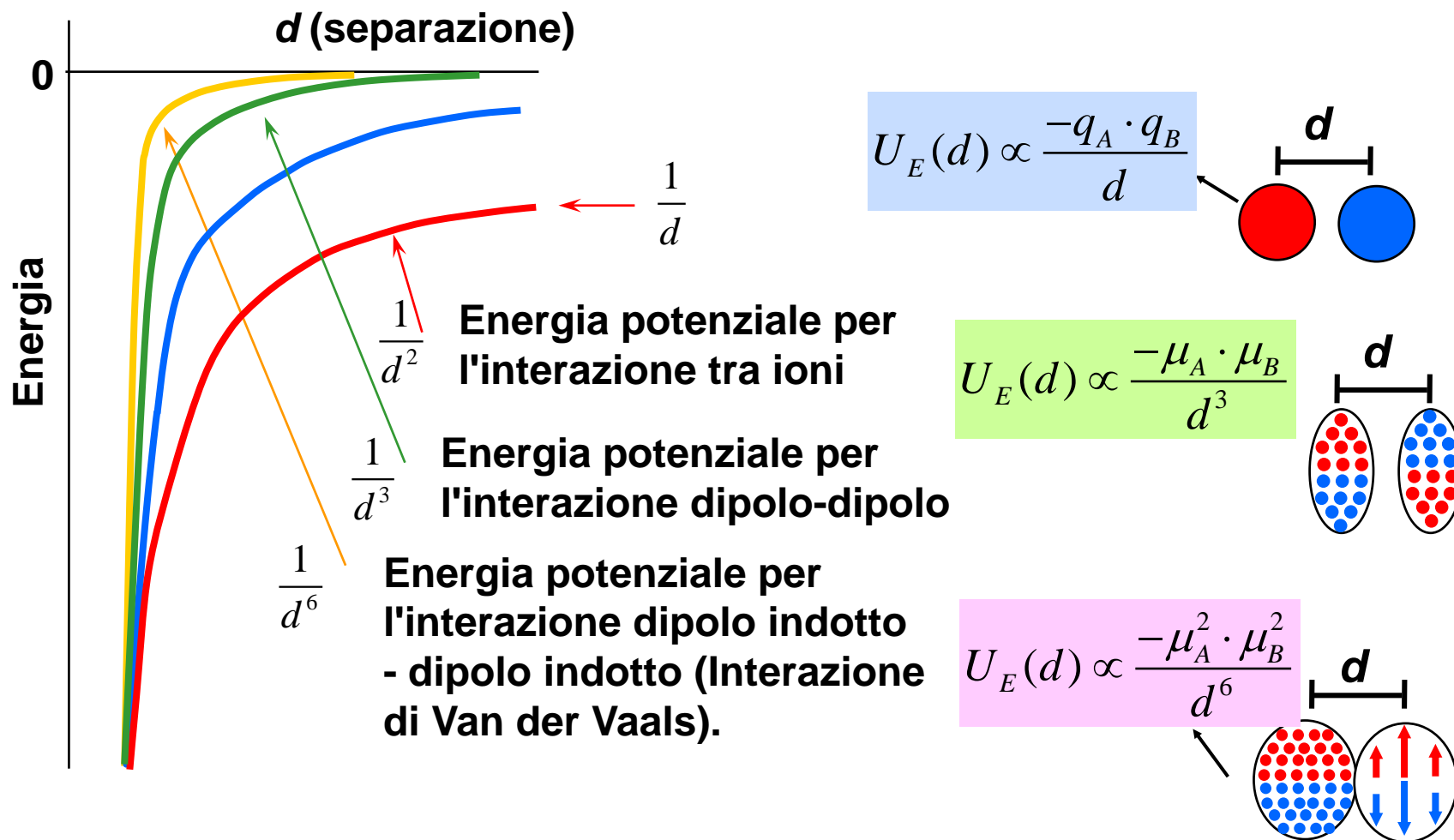


Polarizzabilità statica media per atomi nello stato fondamentale ( $10^{-14} \text{ cm}^3$ )

H	0.667										He	0.2			
Li	24.3	Be	5.6	B	3.03	C	1.76	N	1.10	O	0.80	F	0.56	Ne	0.4
Na	23.6	Mg	10.6	Al	8.34	Si	5.38	P	3.63	S	2.9	Cl	2.18	Ar	1.6
K	43.4	Ca	22.8	Ga	8.1	Ge	6.1	As	4.3	Se	3.8	Br	3.1	Kr	2.5
Rb	47.3	Sr	27.6	In	10.2	Sn	7.7	Sb	6.6	Te	5.5	I	5.5	Xe	4.0



# Interazioni Intermolecolari (Dipendenza dalla Distanza)





## Energia di Legame

La forza di un legame dipende dall'entità con cui le attrazioni superano le repulsioni.

**Energia di Legame** ( $BDE$  = Bond Dissociation Energy) = energia necessaria a spezzare l'attrazione netta tra due atomi in un legame e formare atomi o aggregati di atomi senza separazione di carica (**rottura omolitica**). L'energia di legame è definita come la variazione di entalpia per rompere il legame in 1 mole di gas.

*La rottura di un legame è sempre endotermica:*

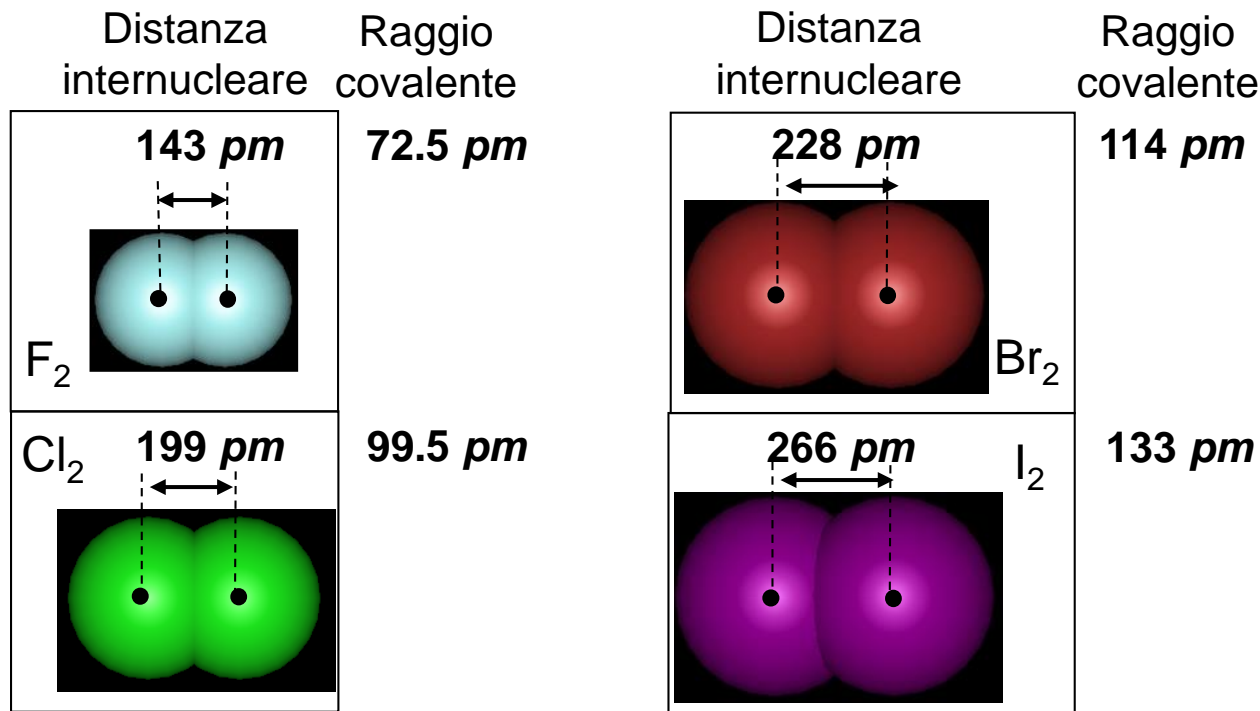


*La formazione di un legame è sempre esotermica.*



## Lunghezza di Legame

**Lunghezza di legame** = distanza di equilibrio tra i nuclei in atomi legati.



Le lunghezze di legame in serie omologhe di legami aumenta all'aumentare della dimensione atomica. Così  $F_2 < Br_2 < Cl_2 < I_2$



## Ordine di Legame e Energia di Legame

Per una certa coppia di atomi, la lunghezza di legame *diminuisce* all'*aumentare* dell'ordine di legame. I nuclei sono spinti più vicino dall'attrazione conseguente all'aumento del numero delle coppie elettroniche di legame.

*Inoltre, anche l'energia di legame aumenta con l'ordine di legame.*

In generale, **più un legame è corto e più è forte.**

- Andamento nelle lunghezze di legame:  $C-I > C-Br > C-Cl > C-H$
- Andamento nelle energie di legame:  $C-I < C-Br < C-Cl < C-H < C-F$

Per legami singoli, i legami più lunghi sono normalmente più deboli.



# Relazione tra Ordine di Legame, Lunghezza di Legame e Energia di Legame

40

Legame	Ordine di Legame	Lunghezza media di Legame (pm)	Energia Media di Legame (kJ·mol <sup>-1</sup> )
C-O	1	143	358
C=O	2	123	745
C≡O	3	113	1070
C-C	1	154	347
C=C	2	134	614
C≡C	3	121	839
N-N	1	146	160
N=N	2	122	418
N≡N	3	110	945





## Esempi di Problemi

Ordinare i legami in ogni serie in ordine di lunghezza di legame e forza di legame crescenti:

(a) Si-F, Si-C, Si-O

(b) N=N, N-N, N:::N

**PIANO:** (a) L'ordine di legame è 1 per tutti e il silicio è legato ad alogeni; le lunghezze di legame devono aumentare e l'energia di legame deve diminuire al crescere del raggio atomico.  
(b) Gli atomi sono tutti gli stessi ma cambia l'ordine di legame; all'aumento dell'ordine di legame la lunghezza di legame diminuisce mentre l'energia di legame aumenta.



## Proprietà Fisiche di Composti Covalenti

Due tipi di forze:

- 1) Intense forze di legame covalente tengono assieme gli atomi in una molecola.
- 2) Deboli forze intermolecolari trattengono le molecole vicine in un campione macroscopico.

Quando un composto molecolare covalente fonde o bolle, le deboli energie intermolecolari sono facilmente superate dall'energia termica

→ le sostanze molecolari covalenti sono facili da fondere e bollire.

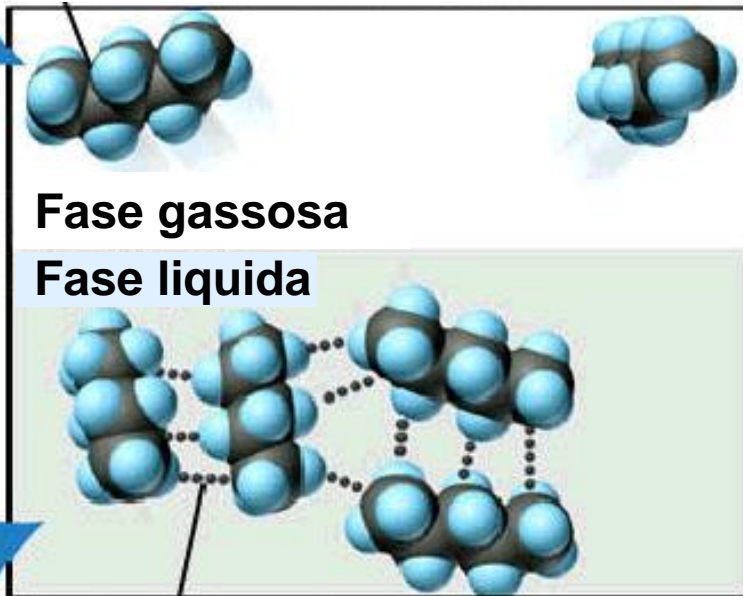
Alcuni solidi covalenti consistono di reticoli macroscopici di atomi tenuti assieme da legami covalenti (alti punti di fusione).

- diamante (reticolo di legami C-C), p.f. = 3550 °C.
- quarzo (reticolo di legami Si-O), p.f. = 1550 °C.
- Boro (reticoli di legami B-B), p.f. = 2250 °C.

**Pentano ( $C_5H_{12}$ )**



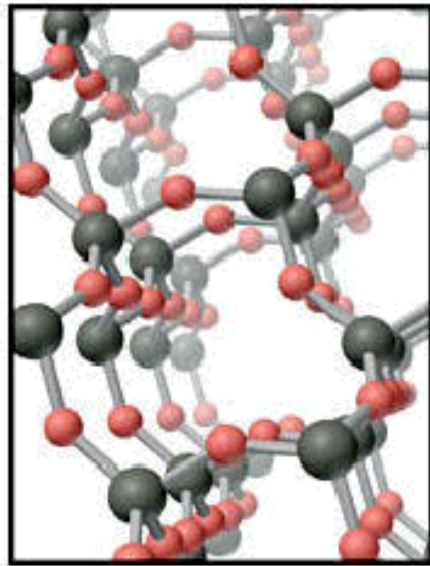
**Forti forze di legame covalente  
*all'interno* delle molecole**



**Deboli forze intermolecolari  
*tra* le molecole**

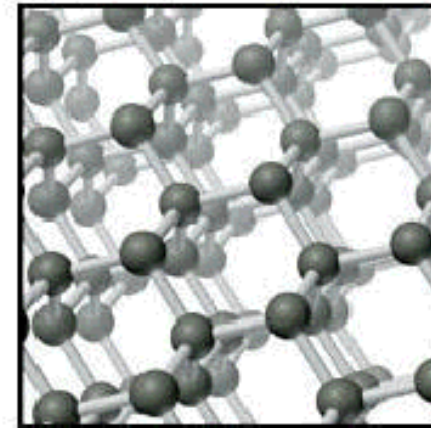


Reticoli macroscopici di atomi tenuti assieme da legami covalenti



A **Quarzo** ● Silicio

● Ossigeno

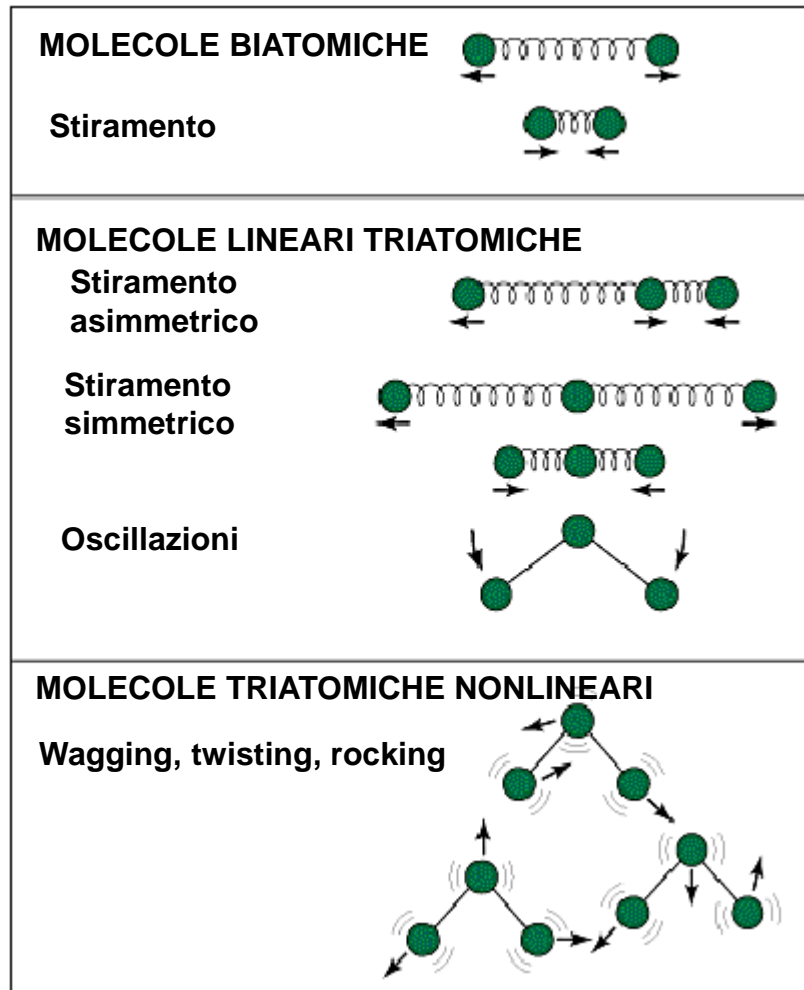


B **Diamante** ● Carbonio

**Alti punti di fusione ed ebollizione**



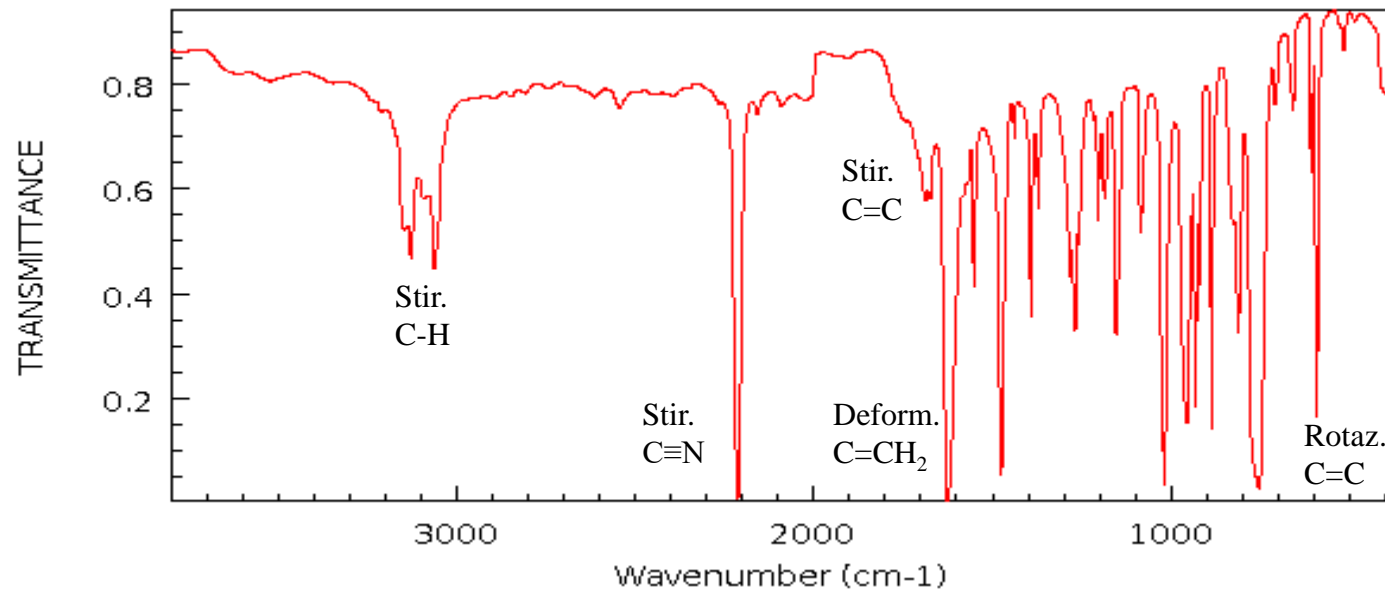
# Alcuni Movimenti delle Molecole



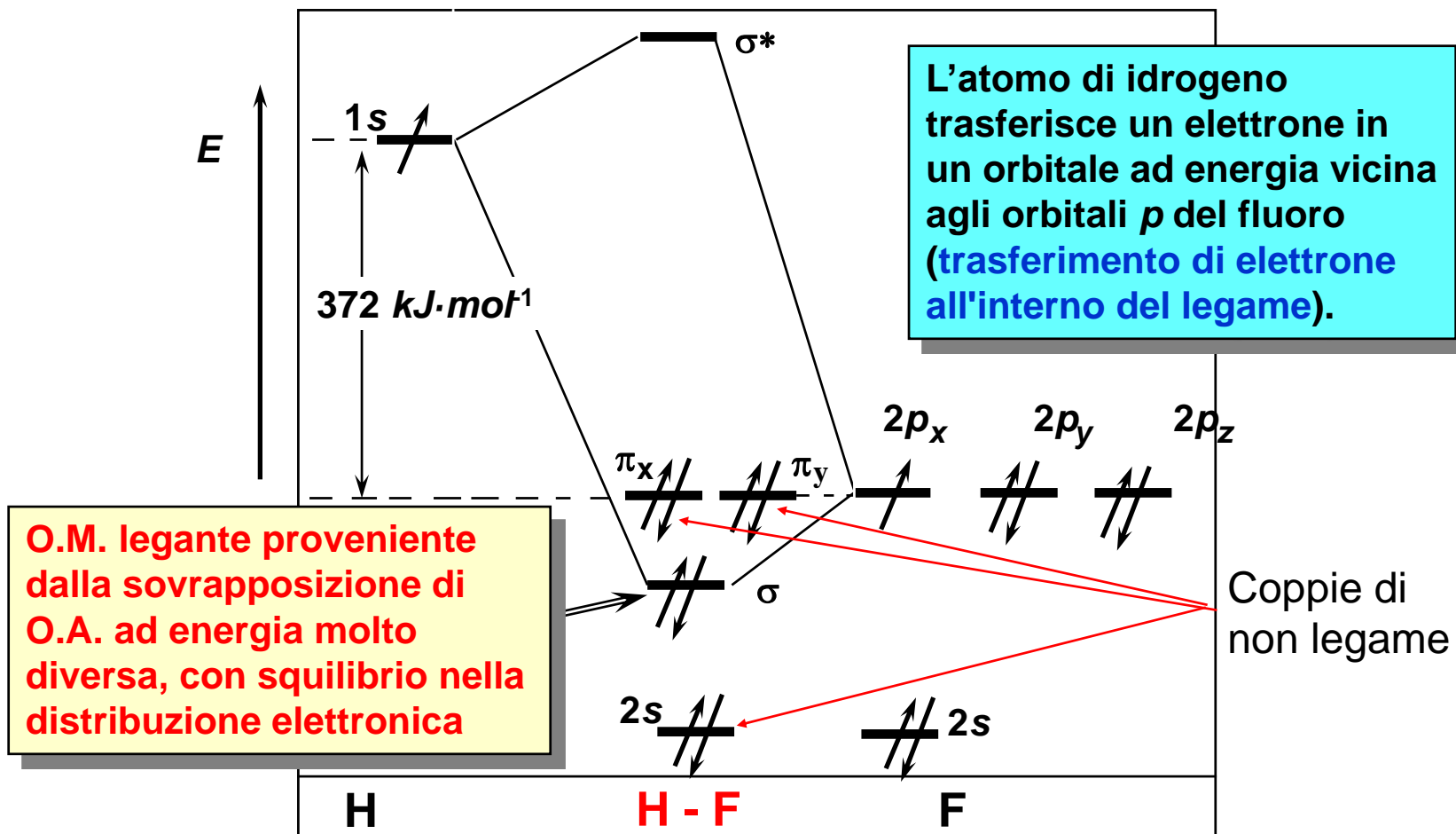


# Spettro Infrarosso dell'Acrlonitrile

I movimenti degli atomi nelle molecole e nei solidi sono quantizzati:  
**Spettroscopia Infrarosso e Spettroscopia Raman**



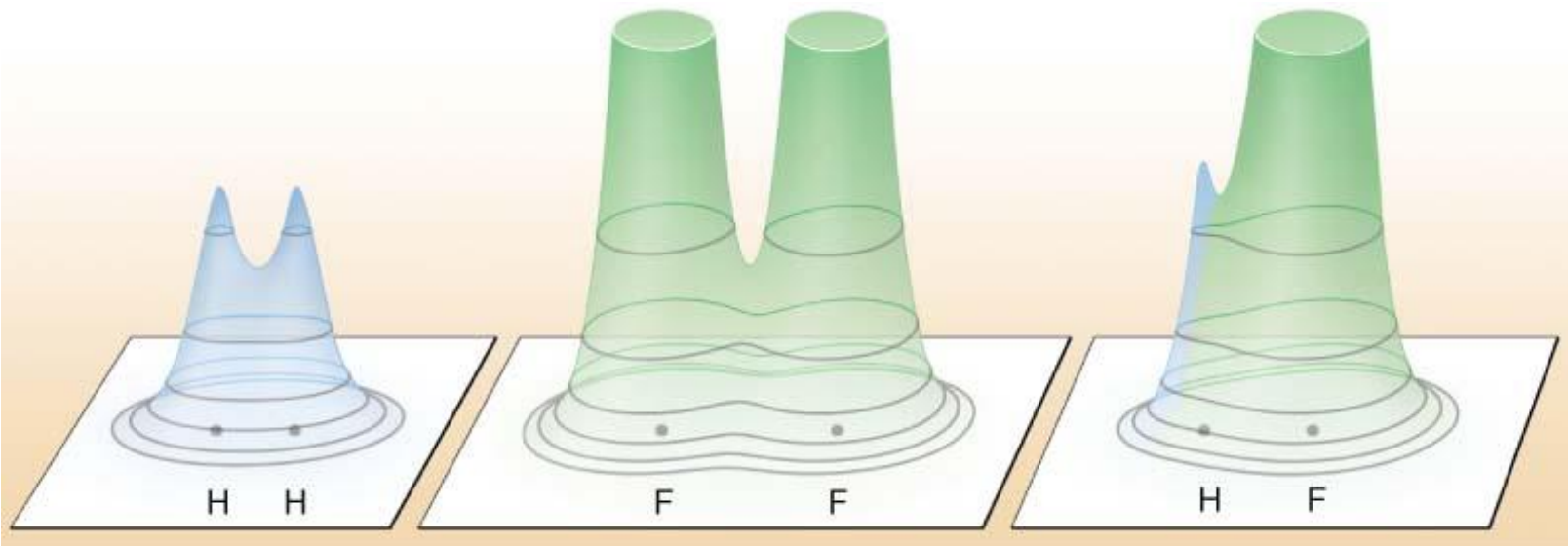
# Molecole Biatomiche Eteronucleari (HF)





# Densità di Distribuzione Elettronica in Molecole $H_2$ , $F_2$ e $HF$

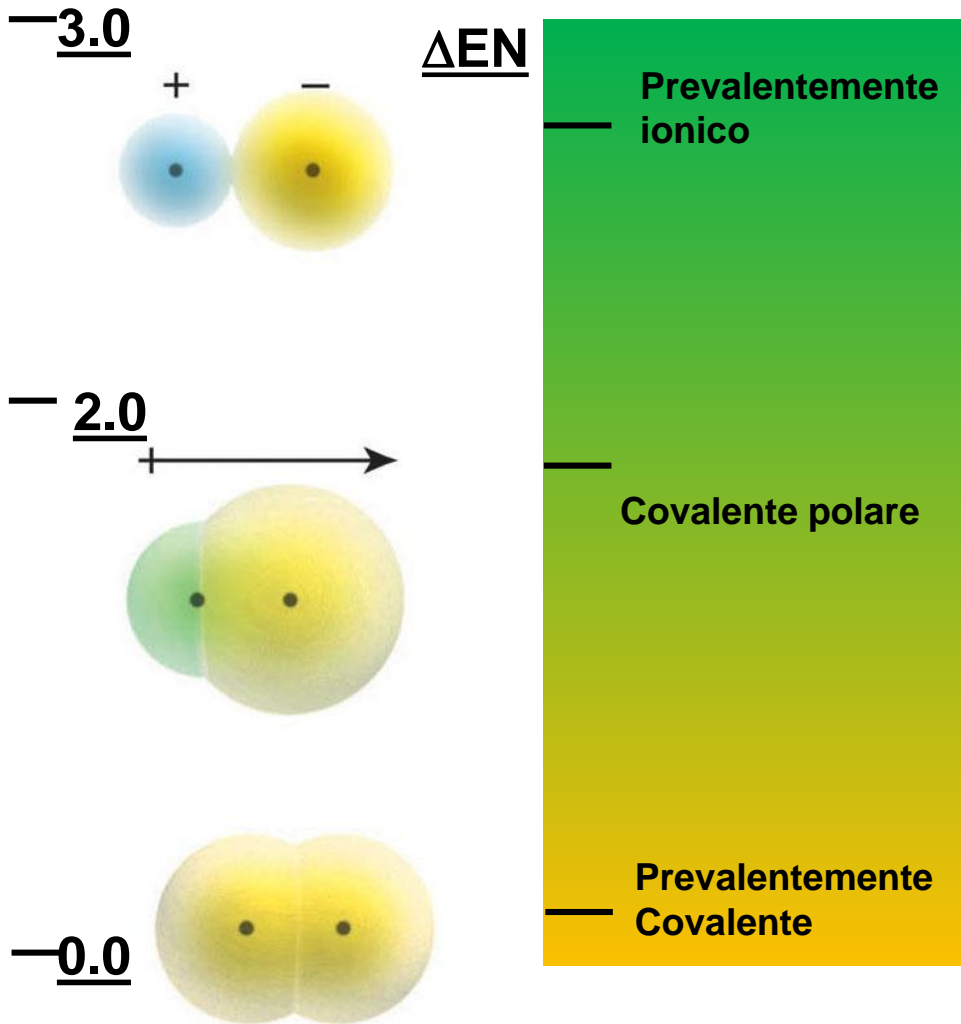
48







# Classificazione del Carattere Ionico dei Legami Chimici



$\Delta EN$	CARATTERE IONICO
$> 1.7$	Prevalentemente ionico
0.4-1.7	Covalente polare
$< 0.4$	Prevalentemente coval.
0	Covalente omeopolare

# Legami *Sigma*, *Pi-greca* e *Delta*

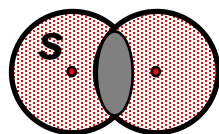
Un legame in una molecola deriva da sovrapposizioni positive di orbitali atomici (orbitale molecolare legante). Si classificano in funzione del numero dei piani nodali passanti per i nuclei :

**legami sigma ( $\sigma$ ),**

**pi greca ( $\pi$ ),**

**delta ( $\delta$ )**

orbitali *s*

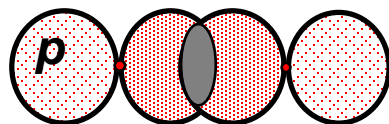


$s\sigma$

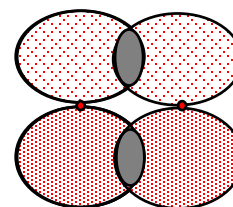
impossibile

impossibile

orbitali *p*



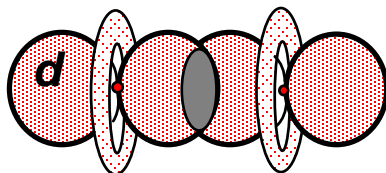
$p\sigma$



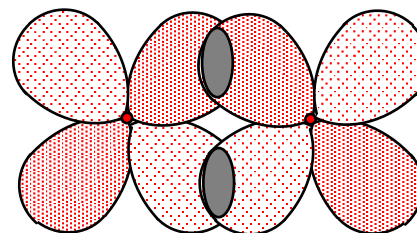
$p\pi$

impossibile

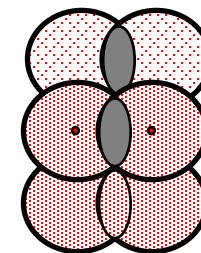
orbitali *d*



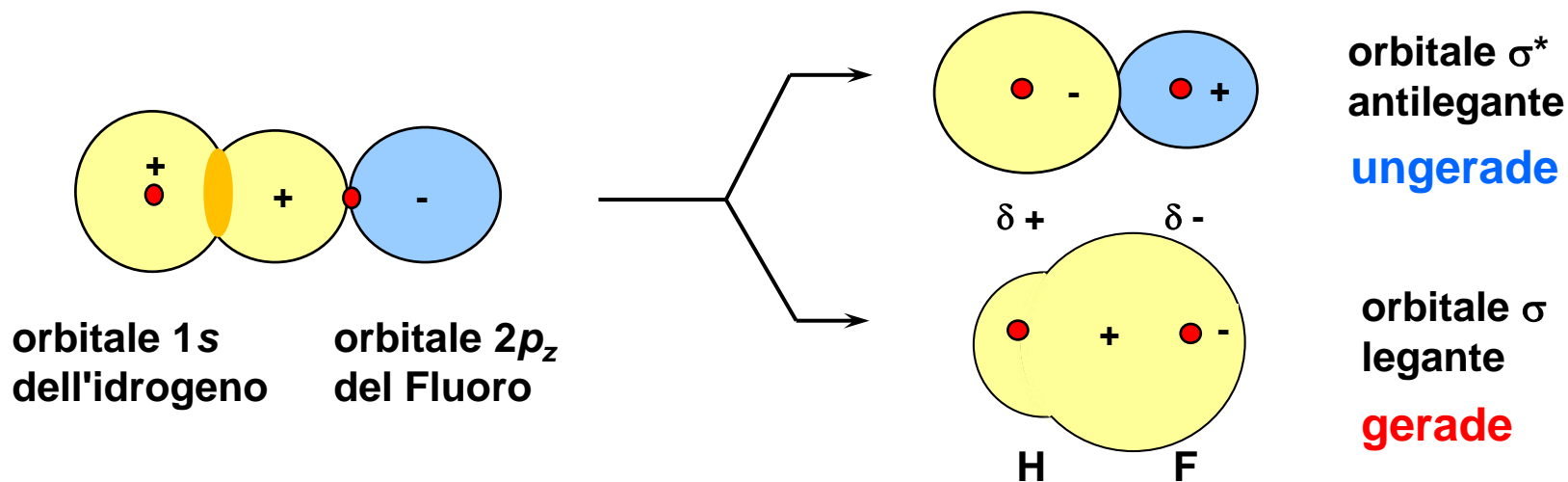
$d\sigma$



$d\pi$

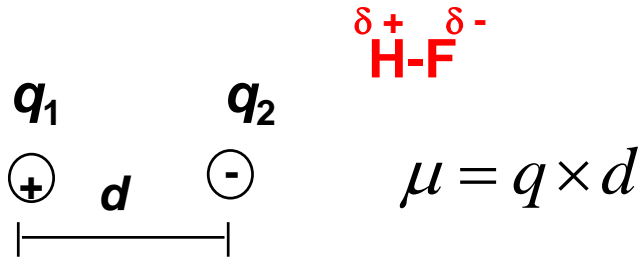


$d\delta$

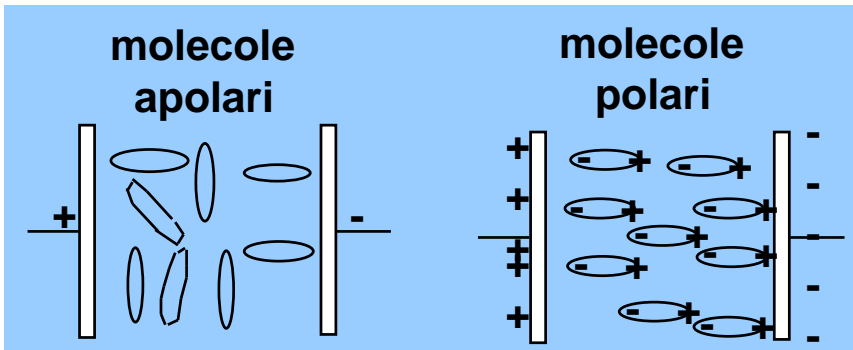


La separazione di carica dipende dalla elettronegatività degli atomi: più sono elettronegativi e più trattengono gli elettroni di legame

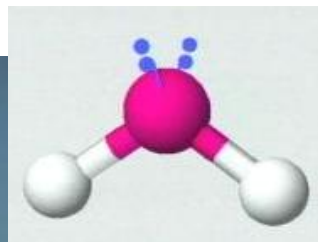
**Momento dipolare** :  $\mu = q \cdot r$   
momento elettrico generato dalla distribuzione non simmetrica della carica  $q$  a distanza  $r$ .



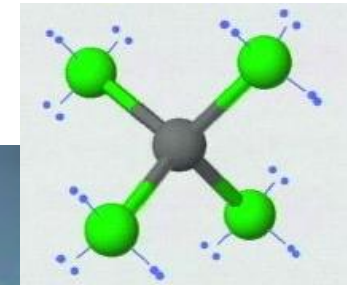
Se  $q = 4.8 \times 10^{-10} \text{ u.e.s. (e}^-)$   
 $d = 10^{-10} \text{ m (dist. legame)}$   
 $\mu = 4.8 \times 10^{-20} \text{ u.e.s. } \mu = 4.8 \text{ debay}$



**% Carattere ionico =**  
 $(\mu_{\text{HF}} / \mu_{\text{teor.}}) \times 100 = 41\%$



**H<sub>2</sub>O**



**CCl<sub>4</sub>**



# ELETRONEGATIVITA'

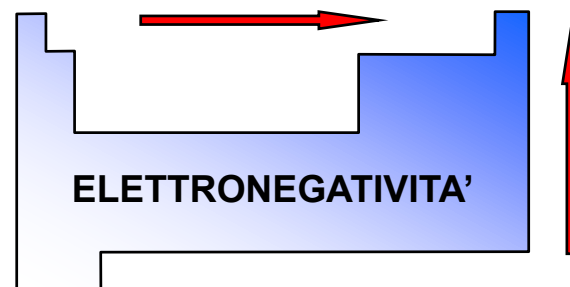
Una misura della tendenza di un atomo ad attrarre a se elettroni in un composto (cioè quando legato chimicamente)

VALORI IMPORTANTI: F = 4.0 su scala arbitraria  
H = 2.2 (scala Pauling)

## FLUORO

- Elemento più elettronegativo

### Andamenti Periodici





## Tendenza di un atomo ad acquisire elettroni in legami.

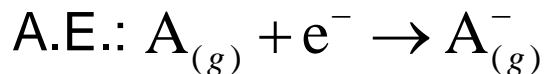
- Normalmente l'elettronegatività si valuta secondo Pauling in base alla tendenza a prendere elettroni in un legame chimico A-B ed è perciò in qualche modo correlata all'energia del legame:

$$|\chi_A - \chi_B| = 0.102\sqrt{\Delta'}$$

dove  $\Delta'$  è definita come energia di risonanza ionica dipendente dall'energia del legame formato tra l'atomo A e l'idrogeno (B):

$$\Delta'(A-B) = D(A-B) - \frac{[D(A-A) + D(B-B)]}{2}$$

La definizione (secondo Pauling) si riferisce quindi ad un elettrone acquistato da un altro atomo anziché riferirsi alla particella libera in fase gas (questa energia è invece quantificata dall'Affinità Elettronica A.E.)



**BDE = Energia di Dissociazione di Legame ( $A-A \rightarrow A\cdot + A\cdot$ )**

## Elettronegatività secondo Pauling

F-F En. legame =  $156 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

H-H En. legame =  $458 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$

H-F (covalente) =  $(458 + 156)/2 = 307 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$  (media aritmetica)

H-F (covalente) =  $\sqrt{(458)\times(156)} = 267 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$  (media geometrica)

**H-F En. legame =  $565 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$**

$\Delta = (565 - 267) = 298 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$  (energia elettrostatica in eccesso)

$$|\chi_{\text{H}} - \chi_{\text{F}}| = 0.10\sqrt{\Delta}$$

$$\chi_{\text{H}} = 2.2 \quad (\text{assunto per convenzione})$$

$$\chi_{\text{F}} = 4.0$$



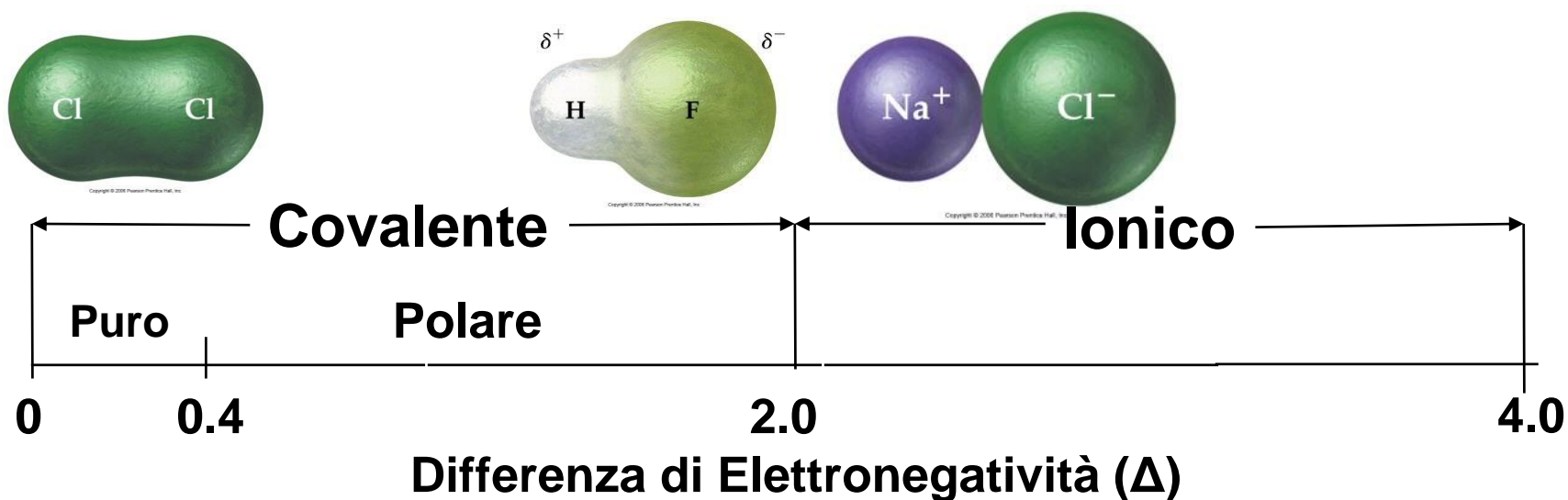
# Le Tre Scale di Elettronegatività

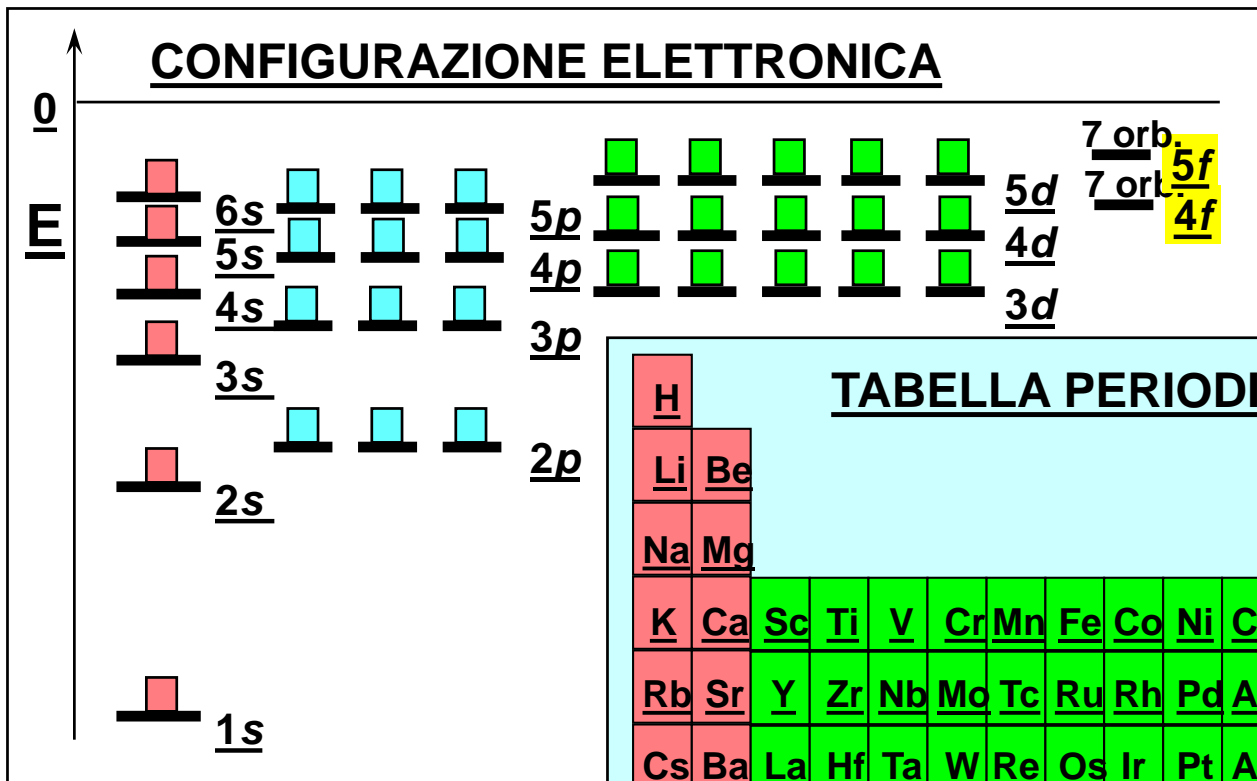
<b>Elemento</b> Pauling Sanderson A. Rochow	<b>H</b> 2.20 2.31 2.20																	<b>He</b> NA NA NA
<b>Elemento</b> Pauling Sanderson A.-Rochow	<b>Li</b> 0.98 0.86 0.97	<b>Be</b> 1.57 1.61 1.47											<b>B</b> 2.04 1.88 2.01	<b>C</b> 2.55 2.47 2.50	<b>N</b> 3.04 2.93 3.07	<b>O</b> 3.44 3.46 3.50	<b>F</b> 3.98 3.92 4.10	<b>Ne</b> NA NA NA
<b>Elemento</b> Pauling Sanderson A.-Rochow	<b>Na</b> 0.93 0.85 1.01	<b>Mg</b> 1.31 1.42 1.23											<b>Al</b> 1.61 1.54 1.47	<b>Si</b> 1.90 1.74 1.74	<b>P</b> 2.19 2.16 2.06	<b>S</b> 2.58 2.66 2.44	<b>Cl</b> 3.16 3.28 2.83	<b>Ar</b> NA NA 3.20
<b>Elemento</b> Pauling Sanderson A.-Rochow	<b>K</b> 0.82 0.74 0.91	<b>Ca</b> 1.00 1.06 1.04	<b>Sc</b> 1.36 1.09 1.20	<b>Ti</b> 1.54 1.13 1.32	<b>V</b> 1.63 1.24 1.45	<b>Cr</b> 1.66 1.35 1.56	<b>Mn</b> 1.55 1.44 1.60	<b>Fe</b> 1.83 1.47 1.64	<b>Co</b> 1.88 1.47 1.70	<b>Ni</b> 1.91 1.47 1.75	<b>Cu</b> 1.90 1.74 1.75	<b>Zn</b> 1.65 1.86 1.66	<b>Ga</b> 1.81 2.10 1.82	<b>Ge</b> 2.01 2.31 2.02	<b>As</b> 2.18 2.53 2.20	<b>Se</b> 2.55 2.76 2.48	<b>Br</b> 2.96 2.96 2.74	<b>Kr</b> 3.00 2.91 2.94
<b>Elemento</b> Pauling Sanderson A.-Rochow	<b>Rb</b> 0.82 0.70 0.89	<b>Sr</b> 0.95 0.96 0.99	<b>Y</b> 1.22 0.98 1.11	<b>Zr</b> 1.33 1.00 1.22	<b>Nb</b> 1.60 1.12 1.23	<b>Mo</b> 2.16 1.24 1.30	<b>Tc</b> 1.90 1.33 1.36	<b>Ru</b> 2.20 1.40 1.42	<b>Rh</b> 2.28 1.47 1.45	<b>Pd</b> 2.20 1.57 1.35	<b>Ag</b> 1.93 1.72 1.42	<b>Cd</b> 1.69 1.73 1.46	<b>In</b> 1.78 1.88 1.49	<b>Sn</b> 1.96 2.02 1.72	<b>Sb</b> 2.05 2.19 1.82	<b>Te</b> 2.10 2.34 2.01	<b>I</b> 2.66 2.50 2.21	<b>Xe</b> 2.60 2.34 2.40
<b>Elemento</b> Pauling Sanderson A.-Rochow	<b>Cs</b> 0.79 0.69 0.86	<b>Ba</b> 0.89 0.93 0.97	<b>La</b> 1.10 0.92 1.08	<b>Hf</b> 1.30 0.98 1.23	<b>Ta</b> 1.50 1.04 1.33	<b>W</b> 2.36 1.13 1.40	<b>Re</b> 1.90 1.19 1.46	<b>Os</b> 2.20 1.26 1.52	<b>Ir</b> 2.20 1.33 1.55	<b>Pt</b> 2.28 1.36 1.44	<b>Au</b> 2.54 1.72 1.42	<b>Hg</b> 2.00 1.92 1.44	<b>Tl</b> 2.04 1.96 1.44	<b>Pb</b> 2.33 2.01 1.55	<b>Bi</b> 2.02 2.06 1.67	<b>Po</b> 2.00 NA 1.76	<b>At</b> 2.20 NA 1.90	<b>Rn</b> NA NA 2.06





Differenza di Elettronegatività ( $\Delta$ )	Tipo di Legame
$\Delta > 2$	Ionico
$0.4 < \Delta < 2$	Covalente polare
$\Delta < 0.4$	Covalente



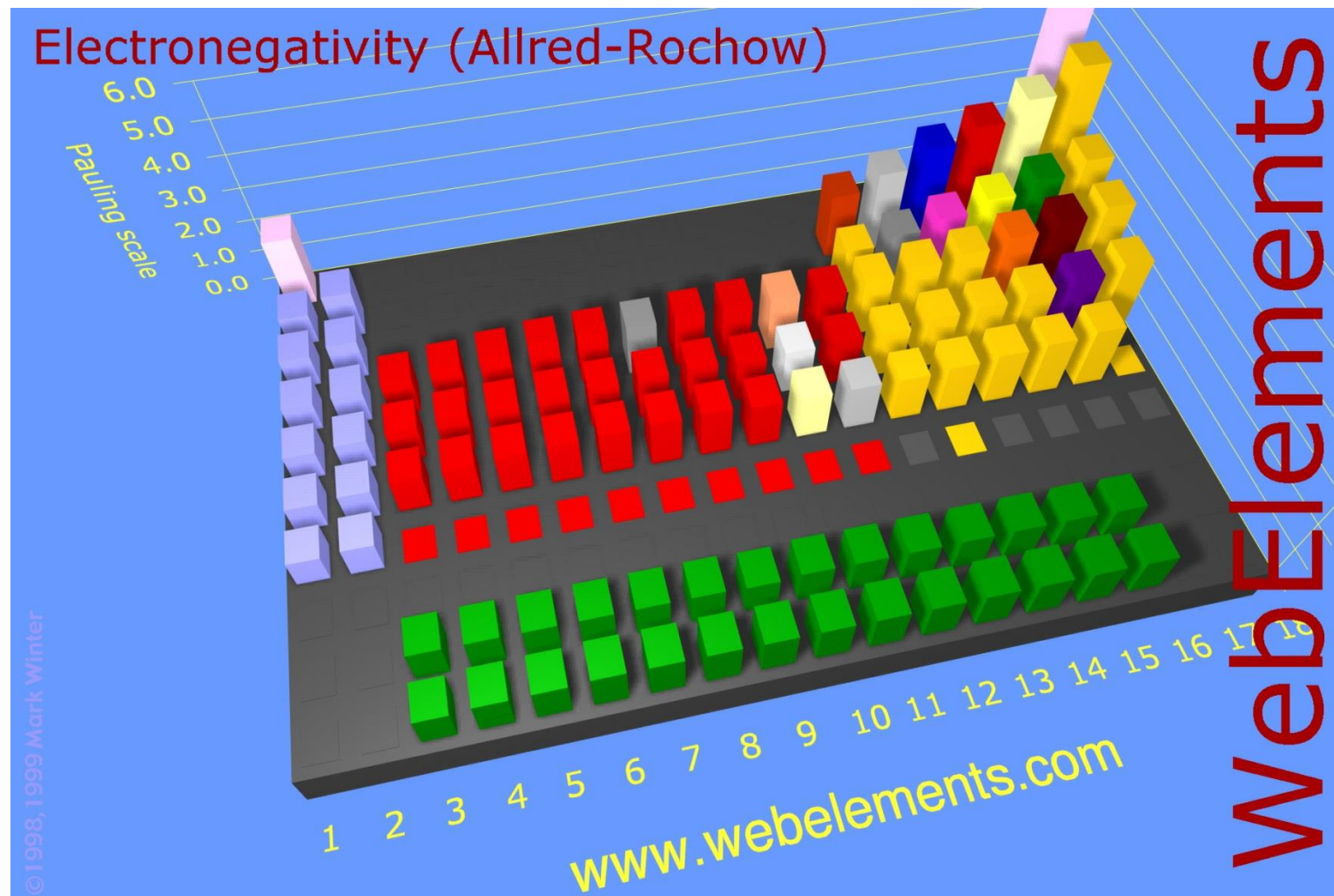


## TABELLA PERIODICA

<u>H</u>																	<u>He</u>
<u>Li</u>	<u>Be</u>											<u>B</u>	<u>C</u>	<u>N</u>	<u>O</u>	<u>F</u>	<u>Ne</u>
<u>Na</u>	<u>Mg</u>											<u>Al</u>	<u>Si</u>	<u>P</u>	<u>S</u>	<u>Cl</u>	<u>Ar</u>
<u>K</u>	<u>Ca</u>	<u>Sc</u>	<u>Ti</u>	<u>V</u>	<u>Cr</u>	<u>Mn</u>	<u>Fe</u>	<u>Co</u>	<u>Ni</u>	<u>Cu</u>	<u>Zn</u>	<u>Ga</u>	<u>Ge</u>	<u>As</u>	<u>Se</u>	<u>Br</u>	<u>Kr</u>
<u>Rb</u>	<u>Sr</u>	<u>Y</u>	<u>Zr</u>	<u>Nb</u>	<u>Mo</u>	<u>Tc</u>	<u>Ru</u>	<u>Rh</u>	<u>Pd</u>	<u>Ag</u>	<u>Cd</u>	<u>In</u>	<u>Sn</u>	<u>Sb</u>	<u>Te</u>	<u>I</u>	<u>Xe</u>
<u>Cs</u>	<u>Ba</u>	<u>La</u>	<u>Hf</u>	<u>Ta</u>	<u>W</u>	<u>Re</u>	<u>Os</u>	<u>Ir</u>	<u>Pt</u>	<u>Au</u>	<u>Hg</u>	<u>Tl</u>	<u>Pb</u>	<u>Bi</u>	<u>Po</u>	<u>At</u>	<u>Rn</u>
<u>Fr</u>	<u>Ra</u>	<u>Ac</u>															
		<u>Ce</u>	<u>Pr</u>	<u>Nd</u>	<u>Pm</u>	<u>Sm</u>	<u>Eu</u>	<u>Gd</u>	<u>Tb</u>	<u>Dy</u>	<u>Ho</u>	<u>Er</u>	<u>Tm</u>	<u>Yb</u>	<u>Lu</u>		
		<u>Th</u>	<u>Pa</u>	<u>U</u>	<u>Np</u>	<u>Pu</u>	<u>Am</u>	<u>Cm</u>	<u>Bk</u>	<u>Cf</u>	<u>Es</u>	<u>Fm</u>	<u>Md</u>	<u>No</u>	<u>Lr</u>		

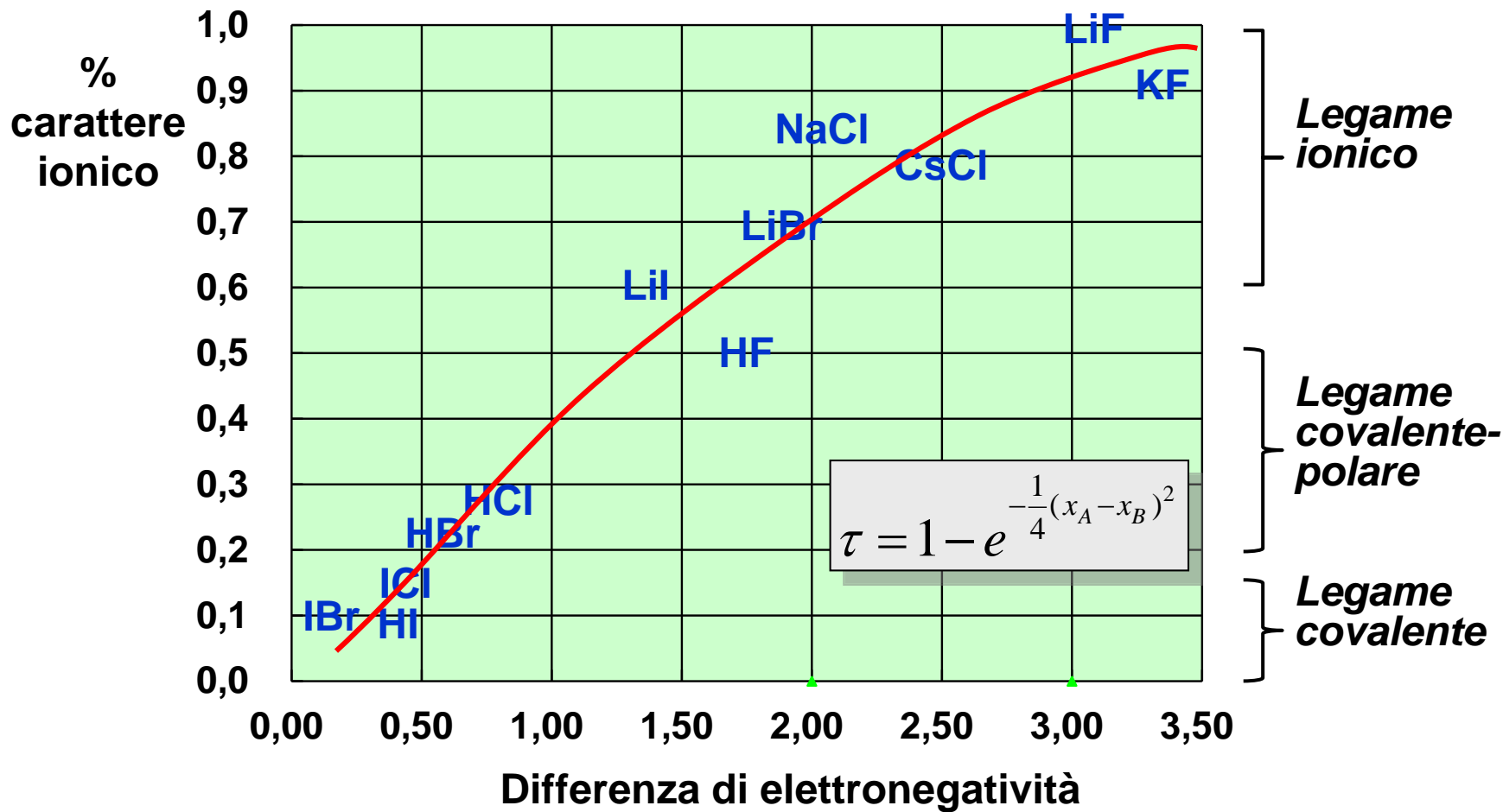


# Elettronegatività degli Elementi

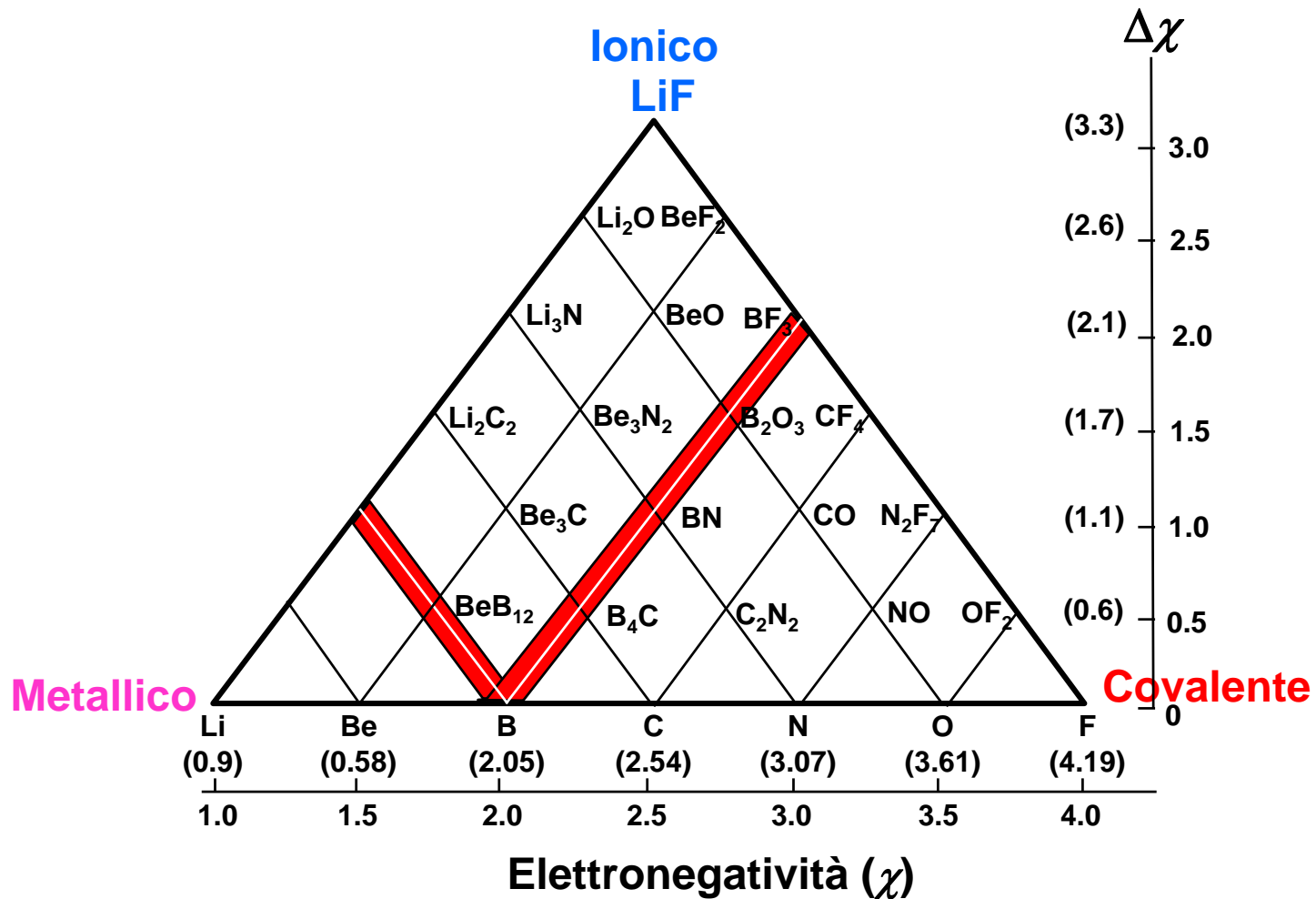




# Relazione tra Carattere Ionico e Differenza di Elettronegatività

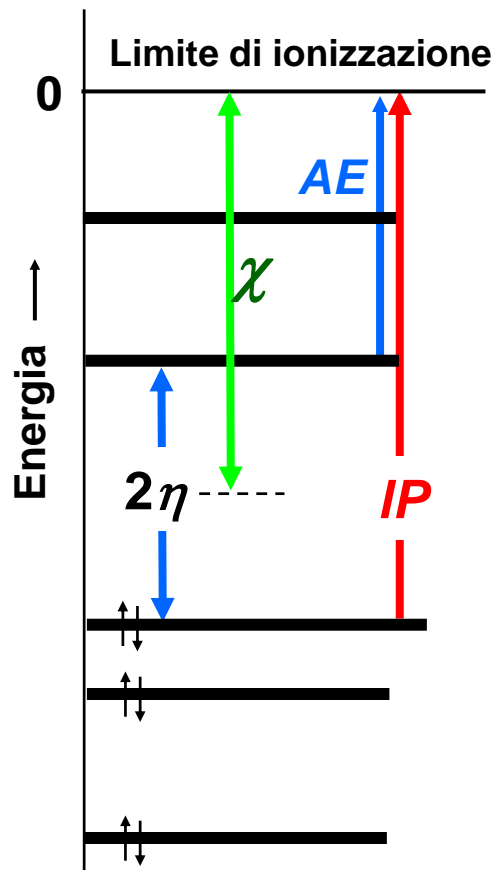


# Carattere del Legame per Elementi del Primo Periodo





# Elettronegatività e Durezza Atomica



$$\eta = \frac{IP - AE}{2}$$

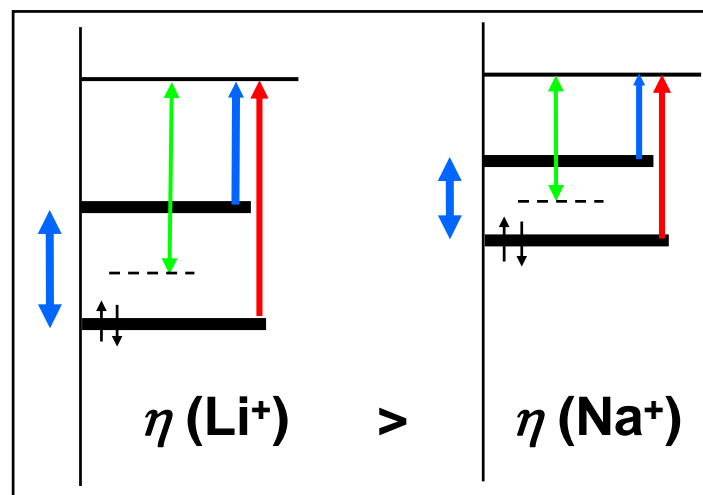
Interpretazione della elettronegatività assoluta e durezza assoluta in termini di livelli energetici atomici.

**IP = Potenziale di ionizzazione**

**AE = Affinità elettronica**

**χ = Elettronegatività assoluta**

**η = Durezza assoluta**



## Situazioni Particolari di Legame

		Esempio
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Legami tra due atomi a uno o tre elettroni</li> </ul>	$\begin{array}{cc} X \cdot Y & X \text{---} Y \\ (2c - 1e) & (2c - 3e) \end{array}$	$N \equiv O$
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Legami a tre atomi (centri) e due elettroni (<math>3c - 2e</math>)</li> </ul>	$\begin{array}{ccc} & X & \\ & \diagdown & / \\ A & \leftarrow & Y \end{array} \quad (3c - 2e)$	$B_2H_6$
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Legami delocalizzati (solidi)</li> </ul>	Legame Metallico	$Fe_{(s)}$
<ul style="list-style-type: none"> <li>• Più di quattro legami (espansione dell'ottetto - implicati gli orbitali <math>d</math> e <math>f</math>). Anche su più centri.</li> </ul> <p><b>Regola dei 18 elettroni</b></p>	Composti di coordinazione	

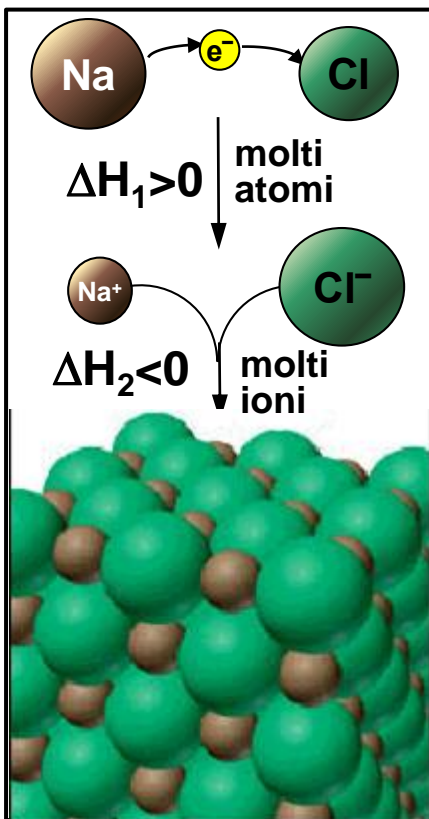
Legati alla tendenza degli atomi a condividere gli elettroni in orbitali molecolari più stabili e delocalizzati su più atomi.



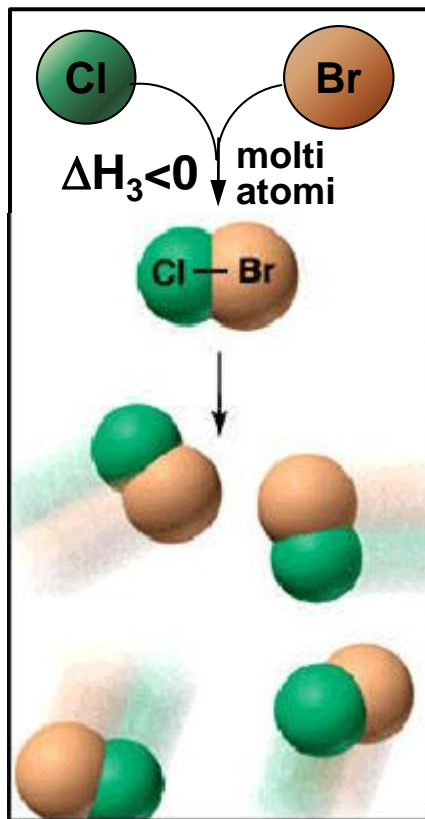
# Punti Essenziali sui Legami Chimici

64

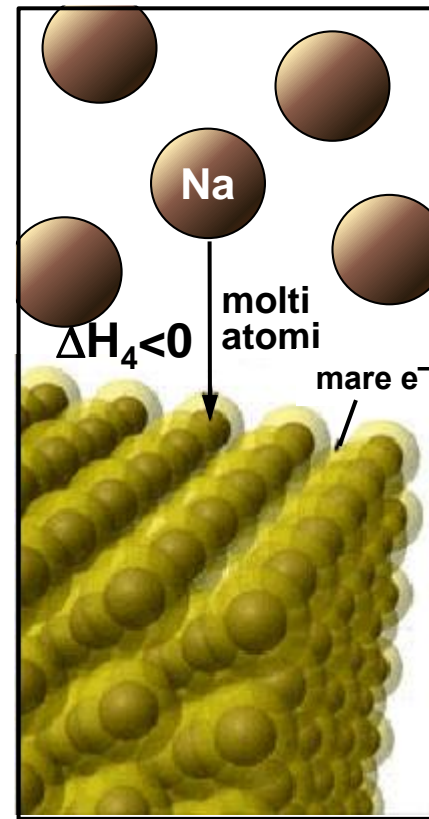




**A Legame ionico**



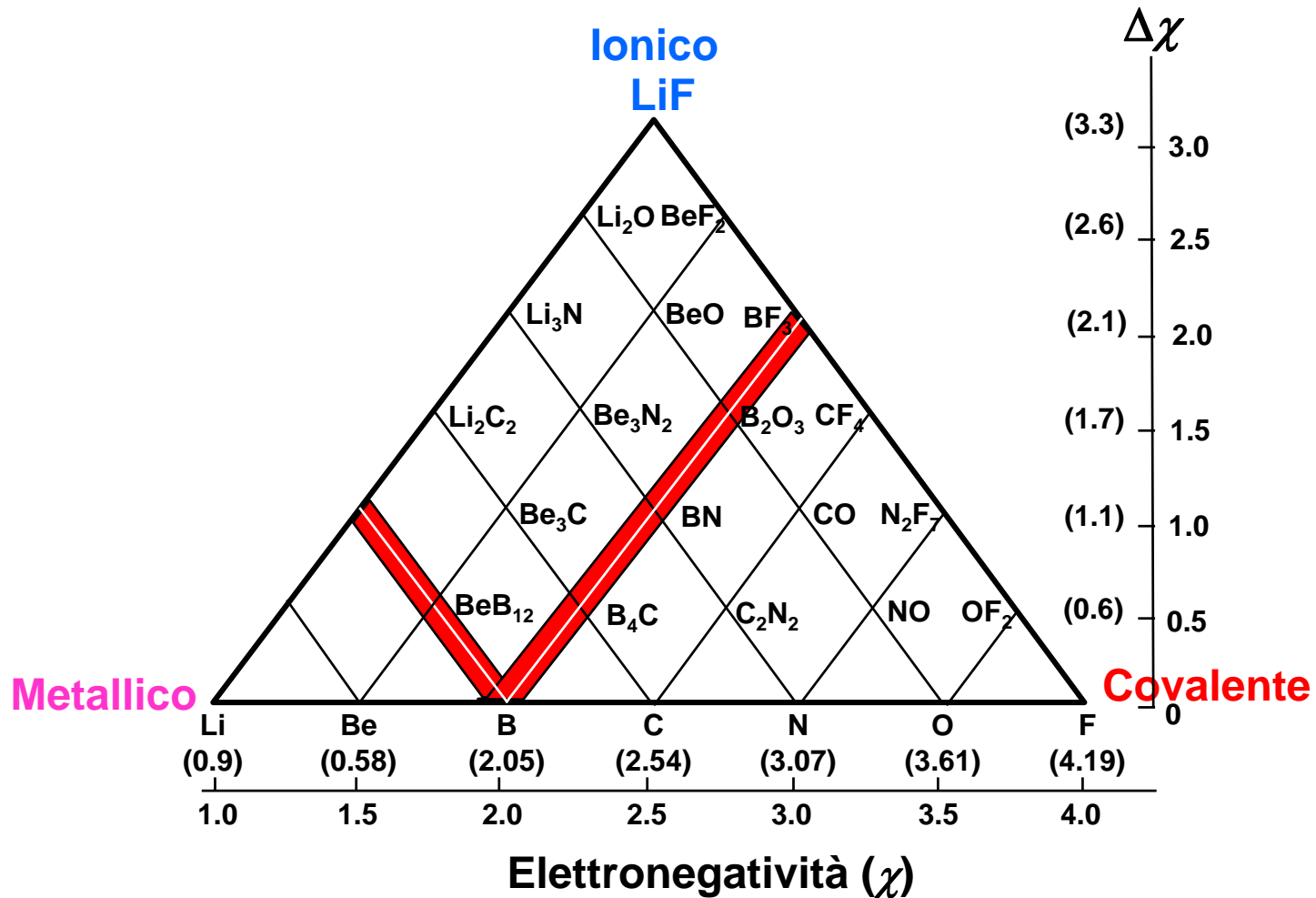
**B Legame covalente**



**C Legame metallico**



# Caratteri Intermedi del Legame per Elementi del Primo Periodo





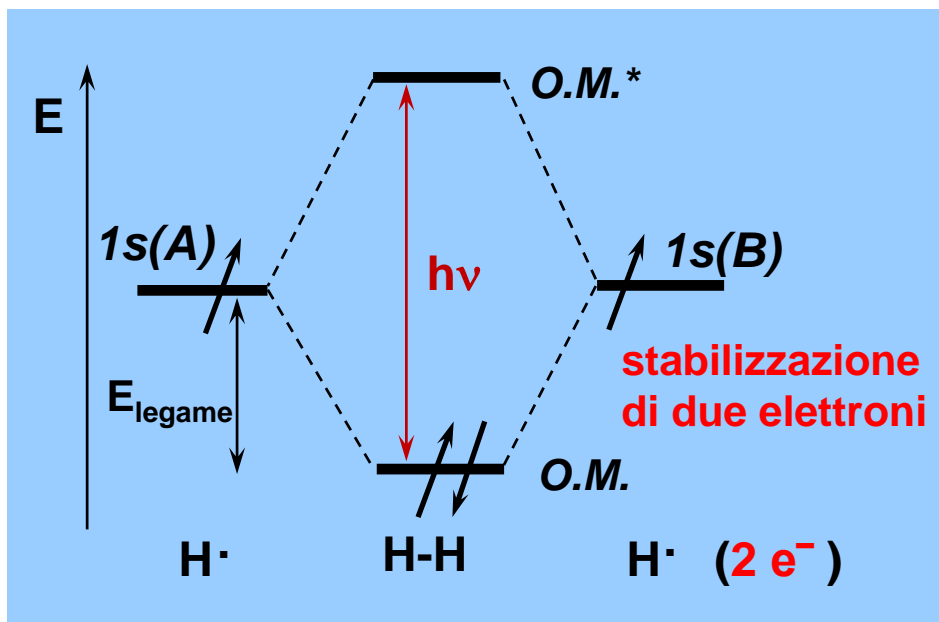
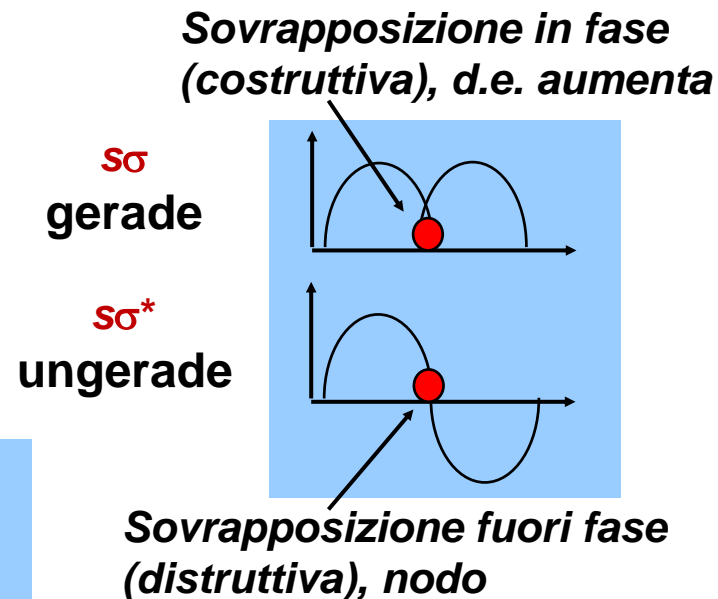
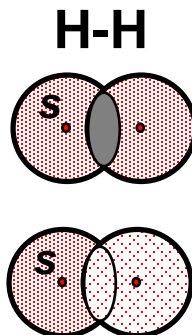
# Legami semplici a Due Elettroni: O.M. Leganti ed Antileganti sigma

$$\psi(\text{VB}) = \psi(1s)\text{A} + \psi(1s)\text{B}$$

(combinazione legante)

$$\psi^*(\text{VB}) = \psi(1s)\text{A} - \psi(1s)\text{B}$$

(combinazione antilegante)

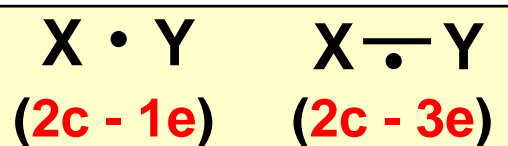


$$OL = (N^\circ e^- OM_{\text{leganti}} - N^\circ e^- OM_{\text{antileganti}})$$

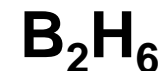
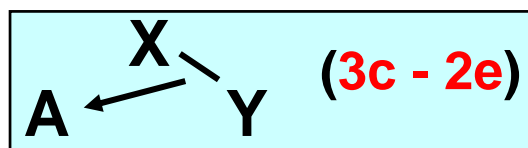
$$OL = (2 - 0)/2 = 1$$

## Situazioni Particolari di Legame

- Legami tra due atomi a uno o tre elettroni



- Legami a tre atomi (centri) e due elettroni ( $3c - 2e$ )



- Legami delocalizzati (solidi)

Legame Metallico



- Più di quattro legami (espansione dell'ottetto - implicati gli orbitali *d* e *f*).

Composti di coordinazione

**Regola dei 18 elettroni**

Legati alla tendenza degli atomi a condividere gli elettroni in orbitali molecolari più stabili e delocalizzati su più atomi.