

# Corso di Studi di Fisica Corso di Chimica

Luigi Cerruti  
www.minerva.unito.it



Lezioni 13-14  
2010

## Configurazioni elettroniche

Descrizioni diverse

H  $1s^1$   
 He  $1s^2$   
 Li  $1s^2 2s^1$   
 Be  $1s^2 2s^2$   
 B  $1s^2 2s^2 2p^1$   
 C  $1s^2 2s^2 2p^2$   
 N  $1s^2 2s^2 2p^3$   
 O  $1s^2 2s^2 2p^4$   
 F  $1s^2 2s^2 2p^5$   
 Ne  $1s^2 2s^2 2p^6$   
 Na  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

Z	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 ↑	$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1$

## TAVOLA PERIODICA degli ELEMENTI

Numero Atomico (Z)      Massa Atomica relativa Ar

Elettronegatività      Valenze

■ GAS  
■ LIQUIDI  
■ SOLIDI  
■ PREPARATI ARTIFICIALMENTE  
■ ELEMENTI DI TRANSIZIONE

by Bottasso & Riba ©

## Il modello di Lewis

### Le regole

Le formule di struttura secondo Lewis costituiscono il metodo più semplice e comunemente usato per mostrare come sono legati tra loro gli atomi in molecole o ioni poliatomici. Esse sono anche il punto di partenza per prevedere la formula sterica dei composti chimici.

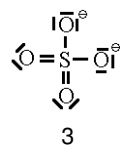
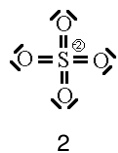
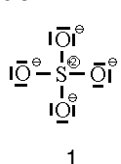
Le strutture di una molecola o di uno ione poliatomico secondo Lewis si possono ottenere abbastanza facilmente nota la configurazione elettronica esterna degli elementi costituenti il composto ed alcune semplici regole:

1. Nelle strutture di Lewis l'atomo di H è sempre terminale (legato ad un solo atomo).
2. Nei composti poliatomici, in genere, l'atomo centrale è quello a più bassa elettronegatività.
3. Tenendo presenti queste due regole si scrive lo scheletro della molecola.
4. Si contano gli elettroni di valenza degli atomi nella molecola.
5. Si sistemano per primi (a coppie) gli elettroni di legame.
6. Si completano gli ottetti degli atomi legati a quello centrale.
7. Se avanzano elettroni si collocano sull'atomo centrale.
8. Se l'atomo centrale non ha 8 elettroni attorno a sé si formano doppi o tripli legami in modo da annullare quante più cariche formali è possibile.

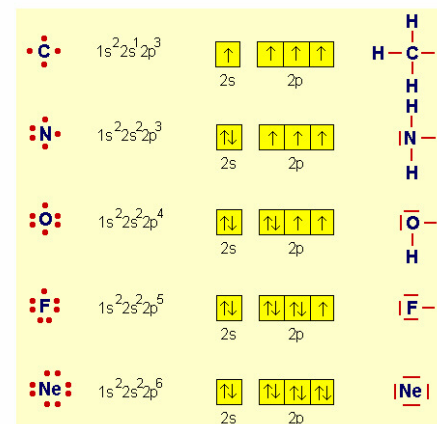
# Il modello di Lewis

## La carica formale

- Carica formale: **differenza tra il numero di elettroni di valenza dell'atomo e il numero di elettroni che ad esso vengono attribuiti nella formula di struttura** della sostanza che l'atomo concorre a formare. Il conteggio degli elettroni da attribuire a ciascun atomo del composto si fa sommando la metà degli elettroni di legame al numero di elettroni di non legame posseduti dall'atomo in questione. Ad esempio:
- La carica formale (CF) dell'atomo di S nello ione solfato descritto nella formula 1 è +2 perché lo zolfo, che è del VI gruppo ed ha 6 elettroni di valenza, si vede, nella formula, attribuiti solo 4 elettroni (metà degli elettroni di legame). Pertanto CF di S = 6 - 4 = 2. Viceversa, gli atomi di ossigeno (VI gruppo e 6 elettroni di valenza) si vedono attribuire dalla formula di struttura 6 elettroni di non legame (tre doppietti) ed 1 elettrone di legame. Pertanto CF di O = 6 - 7 = -1.
- Con motivazioni analoghe è possibile ricavare le cariche formali di S e di O nelle formule 2 e 3.



# Il modello di Lewis



Configurazioni elettroniche dell'atomo centrale e strutture di Lewis per alcuni idruri

Fonte: <http://venus.unive.it/miche/chimrestau/immagini/lewis21.jpg>

Table of Normal and hypervalences			
Elements	Valence	lone pairs	Example
P, As, Sb...	Normal 3	1	$\cdot \bar{\text{P}} \cdot$
	5	0	$\cdot \ddot{\text{P}} \cdot$
S, Se, Te, ...	Normal 2	2	$\cdot \ddot{\text{S}} \cdot$
	4	1	$\cdot \ddot{\text{S}} :$
	6	0	$\cdot \ddot{\text{S}} :$
Cl, Br, I, At...	Normal 1	3	$ \ddot{\text{Cl}} $
	3	2	$:\ddot{\text{Cl}} $
	5	1	$:\ddot{\text{Cl}} $
	7	0	$:\ddot{\text{Cl}}:$

## Valenze e ipervalenze

- Elettroni di valenza del fosforo P:  $3s^2 3p^3$
- E' possibile una 'promozione' che porti alla configurazione  $3s^1 3p^3 3d^1$

## Valence Shell Electron Pair Repulsion VSEPR

- Scopo del modello è la previsione della struttura tridimensionale di molecole del tipo  $AX_n$

## Valence Shell Electron Pair Repulsion VSEPR: Regola 1: l'atomo centrale

		A					
	Be	B	C	N	O	F	Ne
		Al	Si	P	S	Cl	Ar
		Ga	Ge	As	Se	Br	Kr
		In	Sn	Sb	Te	I	Xe
valence electrons around atom A	2	3	4	5	6	7	8
	$\cdot\cdot$	$\cdot\cdot\cdot$	$\cdot\cdot\cdot\cdot$	$\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot$	$\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot$	$\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot$	$\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot\cdot$
	A	A	A	A	A	A	A

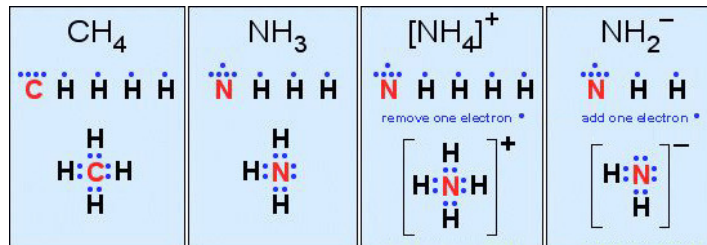
Si conteggiano gli elettroni di valenza per l'atomo centrale  
Attenzione: corrispondono in numero al gruppo del sistema periodico a cui appartiene l'elemento. Ad es. N, gruppo VA

## Valence Shell Electron Pair Repulsion VSEPR: Regola 2: i legandi

ligand X			
H	valency 1	number of electrons	1•
F	valency 1	number of electrons	1•
Cl	valency 1	number of electrons	1•
Br	valency 1	number of electrons	1•
OH	valency 1	number of electrons	1•
O <sup>-</sup>	valency 1	number of electrons	1•
O=	double bond	number of electrons	2••

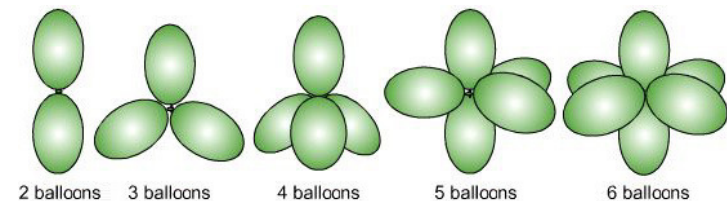
Gli atomi o gruppi di atomi connessi all'atomo centrale sono detti legandi

## Valence Shell Electron Pair Repulsion VSEPR: Regola 3: la struttura di Lewis



In questo terzo passo si scrivono le strutture di Lewis  
Attenzione: nel caso di ioni positivi si tolgono dal conteggio tanti elettroni quante sono le cariche positive. Nel caso di ioni negativi dobbiamo aggiungere tanti elettroni quante sono le cariche nette dello ione

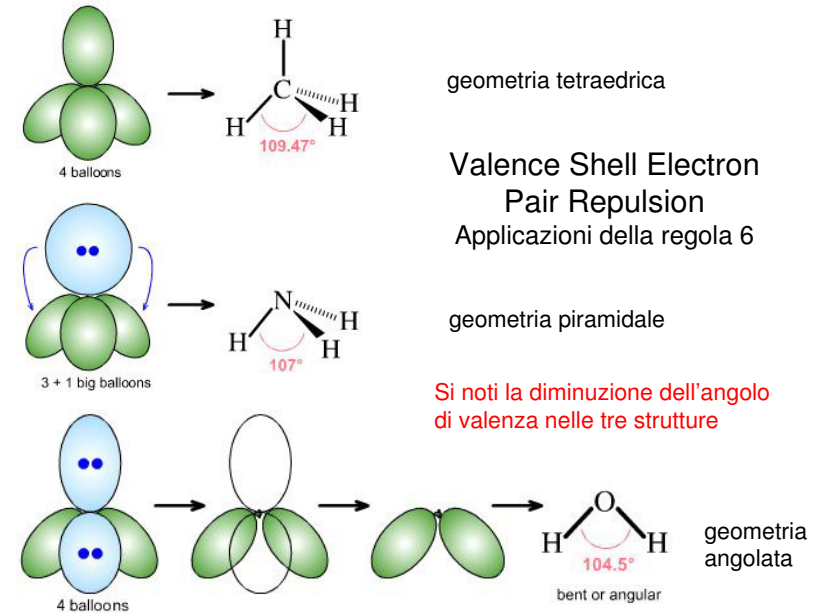
## Valence Shell Electron Pair Repulsion VSEPR: Regole 4 e 5 Coordinazione e repulsione



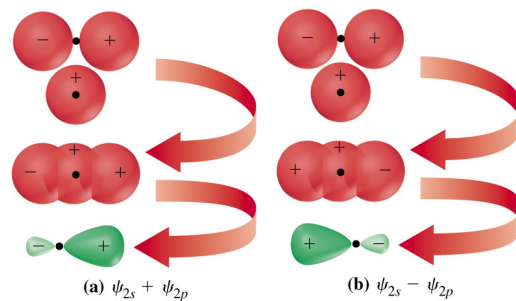
La coordinazione è data dal numero di atomi, gruppi, e doppietti di elettroni connessi all'atomo centrale. Nella figura le diverse coordinazioni sono dette: digonale (2), trigonale (3), tetraedrica (4), trigonale bipyramidale (5), ottaedrica (6).  
La repulsione fra gli elettroni posti 'intorno' all'atomo centrale portano alle geometrie descritte in figura.

# Valence Shell Electron Pair Repulsion VSEPR: Regola 6

- Due aggiustamenti
  - il nome dato alla geometria è determinato solo dagli atomi. Non si tiene conto degli elettroni non leganti
  - la repulsione è maggiore per gli elettroni non leganti

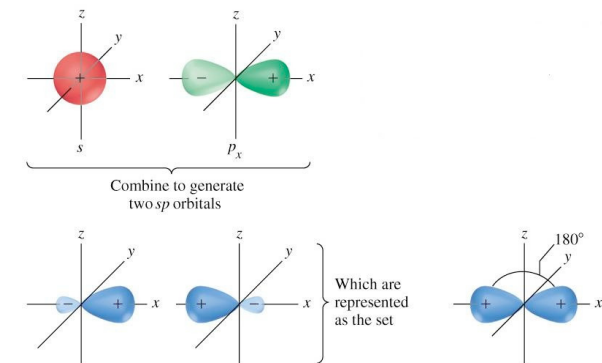


## Orbitali ibridi



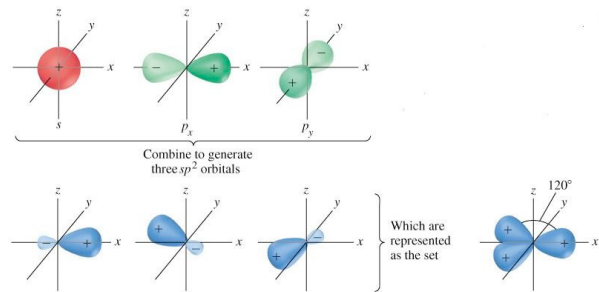
- Combinazione lineare di orbitali con l'origine sullo stesso atomo

## Orbitali ibridi



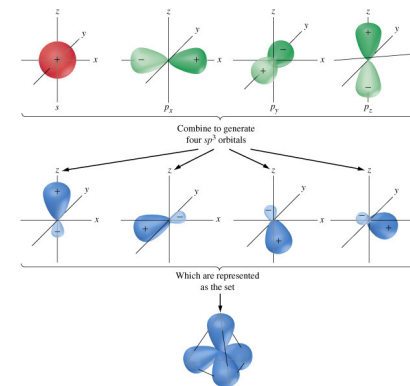
- Due orbitali ibridi *sp*

## Orbitali ibridi



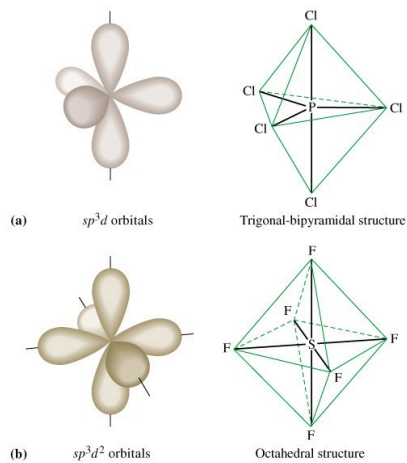
- Tre orbitali ibridi  $sp^2$

## Orbitali ibridi



- Quattro orbitali ibridi  $sp^3$

## Orbitali ibridi

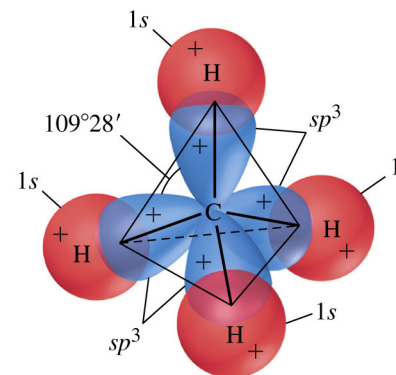


- Cinque orbitali ibridi  $sp^3d$

- Sei orbitali ibridi  $sp^3d^2$

**Questi orbitali ibridi sono possibili solo per elementi con  $n > 2$ , quando i livelli 3d, 4d, ecc. diventano accessibili per gli elettroni 3s3p, 4s4p, ecc.**

## Orbitali ibridi e legami di valenza

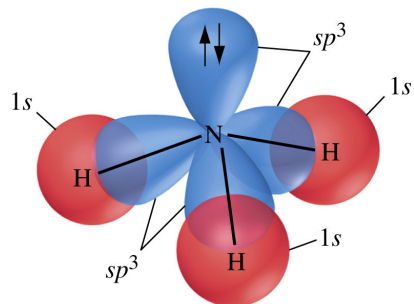


- La molecola del metano

In questo modello si ha la formazione di un legame quando si ha una buona sovrapposizione fra orbitali con l'origine su atomi contigui  
Si ricordi che gli orbitali sono funzioni (si vedano i segni + in figura)

# Orbitali ibridi e legami di valenza

- La molecola dell'ammoniaca



# Energie di legame

Una possibile classificazione

**Legami forti**

- Legame ionico
- Legame covalente → (Energia di legame 50-150 Kcal/mol)
- Legame metallico

210-630 kJ mol<sup>-1</sup>

Interazioni tra atomi o ioni in aggregati poliatomici

**Legami deboli**

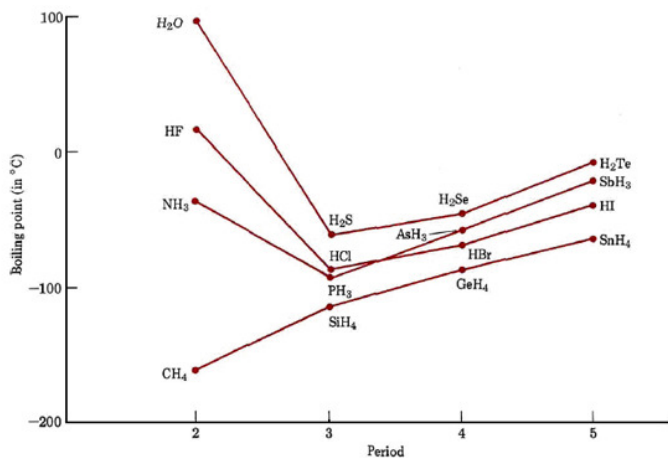
- Legame a idrogeno → 2.5-10 Kcal/mol
- Interazioni di Van der Waals → 0.5-1 Kcal/mol

10-40 kJ mol<sup>-1</sup>  
2-4 kJ mol<sup>-1</sup>

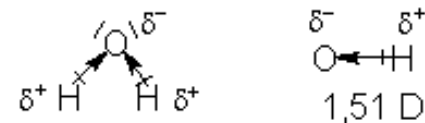
Interazioni tra molecole o atomi che determinano lo stato di aggregazione della sostanza

1 kcal mol<sup>-1</sup> = 4,1840 kJ mol<sup>-1</sup>  
 Fonte: <http://dicasm.ing.unibo.it/finelli/lucidi/legamechimico.pdf>

# Una questione da risolvere

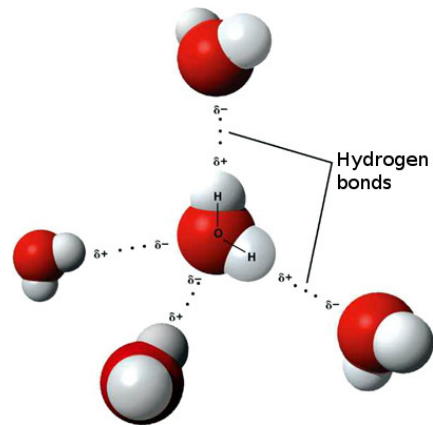


# Dipoli molecolari

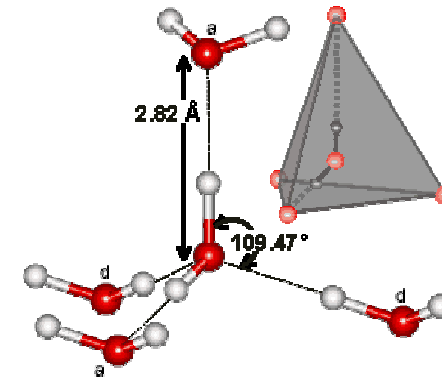


- Momento dipolare:  $\mu = \delta \cdot d$
- D (debye) =  $10^{-18}$  ues cm

## Il legame a idrogeno

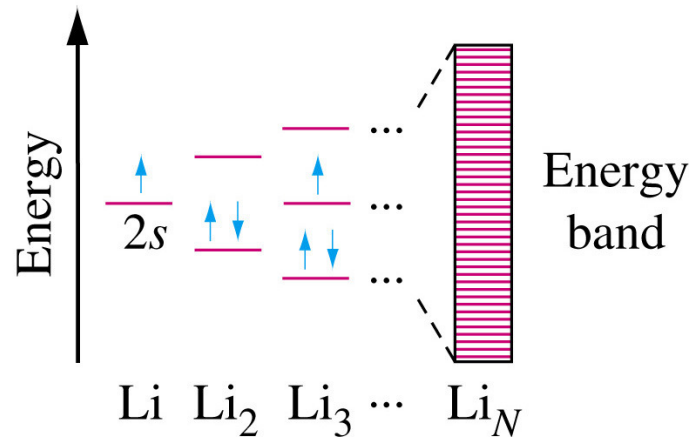


## Il legame a idrogeno

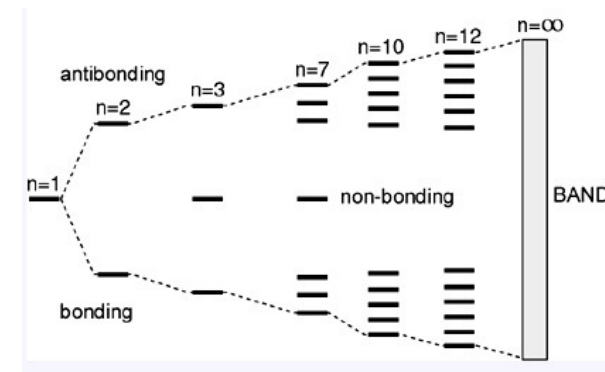


## Il legame metallico

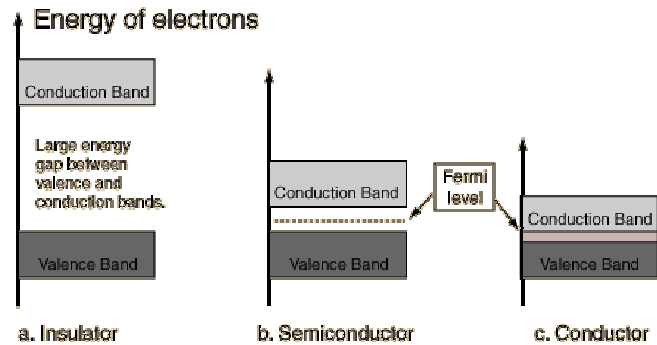
La formazione delle bande di energia nel metallo



## Formazione del legame metallico



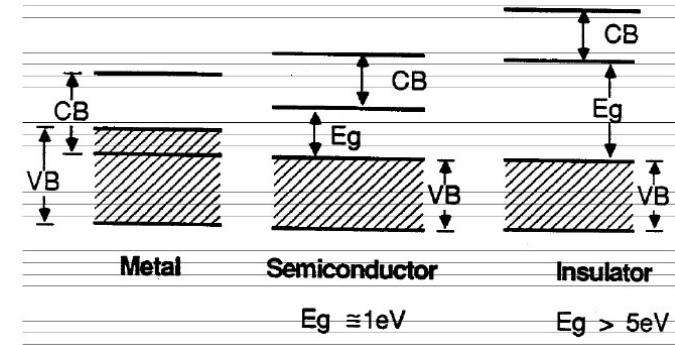
# Classificazione dei conduttori



Il livello di maggior energia occupato dagli elettroni di conduzione allo zero assoluto si denomina livello di Fermi

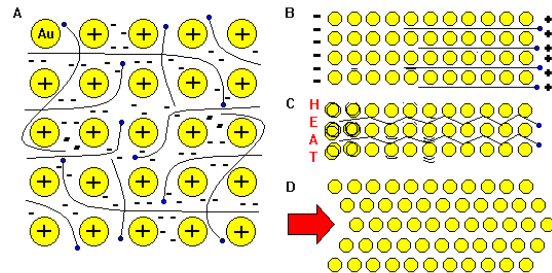
# Classificazione dei conduttori

VB: banda di valenza    CB: banda di conduzione



Tutti gli stati in VB e CB sono permessi  
 Nei metalli le due bande si sovrappongono.  
 Nei semiconduttori e negli isolanti l'intervallo di energia  $E_g$  corrisponde a livelli proibiti

## Proprietà dei metalli Un riassunto iconografico



- **A:** libera circolazione degli elettroni
- **B:** conduzione elettrica
- **C:** conduzione termica; è dovuta agli elettroni, in quanto il contributo delle oscillazioni elastiche dei nuclei è trascurabile
- **D:** malleabilità