

LEGAMI COVALENTI POLARI E NONPOLARI

- **Legami covalenti non-polari o omeopolari**
 - **Gli elettroni sono condivisi in modo uguale**
 - **La distribuzione di carica è simmetrica**
- **DEVONO ESSERE ATOMI UGUALI PERCHE' GLI ELETTRONI SIANO CONDIVISI PERFETTAMENTE**



LEGAMI COVALENTI POLARI E NONPOLARI

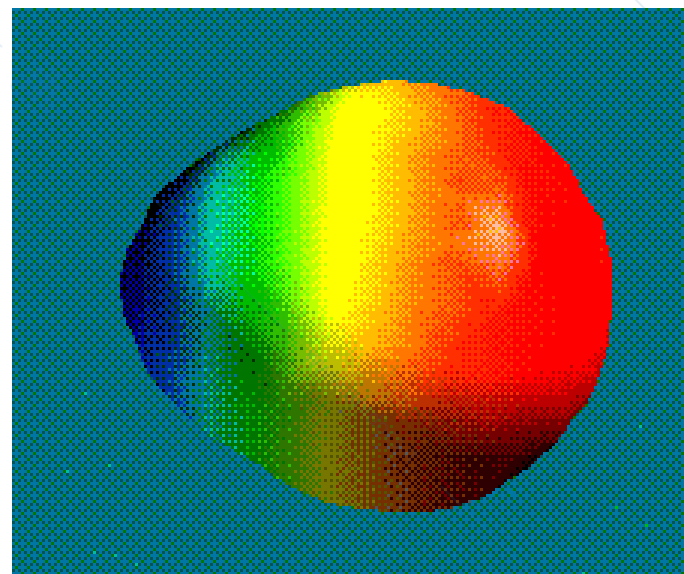
- **Legami covalenti polari**
 - **Elettroni condivisi in modo non uguale**
 - **Distribuzione di carica asimmetrica**
 - **Atomi aventi diversa elettronegatività**

	H	F
Electronegativities	2.1	4.0
Difference =	1.9	verypolarbond

LEGAMI COVALENTI POLARI E NONPOLARI

- **Mappa di densità elettronica di HF**

- Area blu – bassa d.e.
- Area rossa - alta d.e.

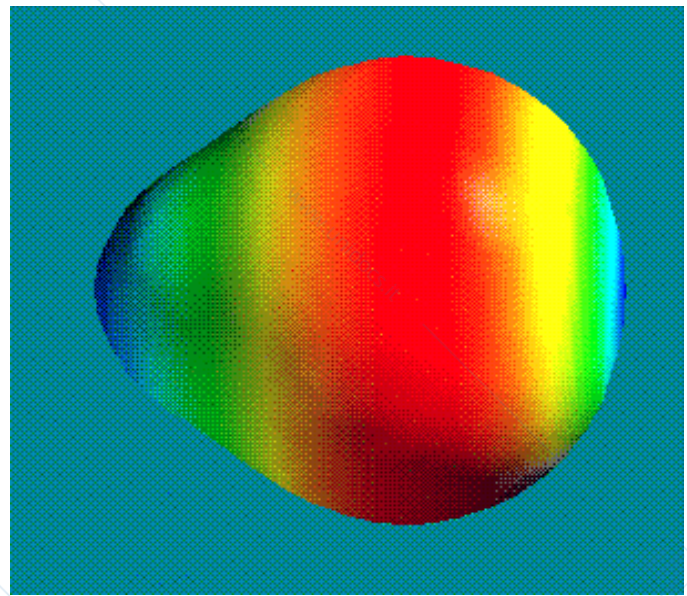


- **Nelle molecole polari i centri di carica negativa e positiva sono SEPARATI**

	H	I
Electronegativities	2.1	2.5
Difference=0.4	slightly polar bond	

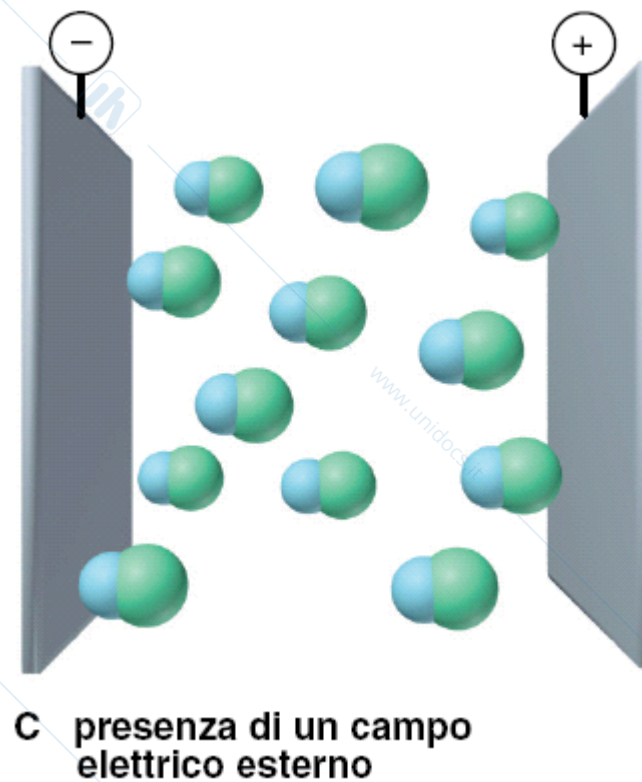
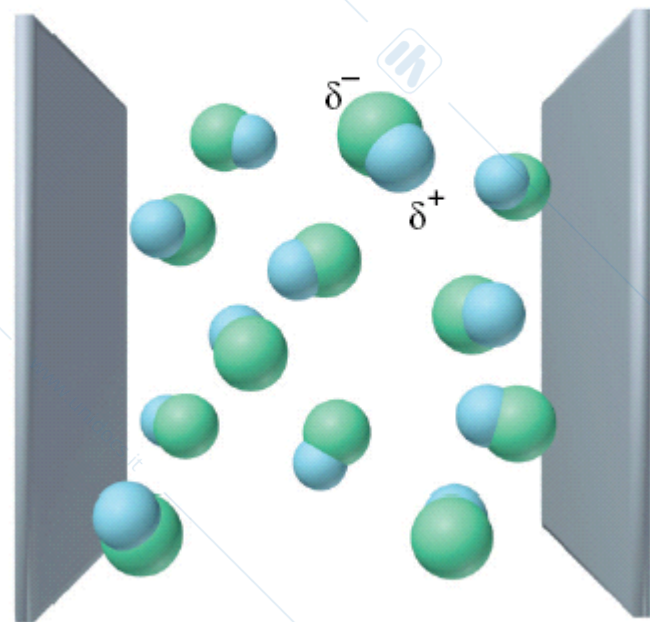
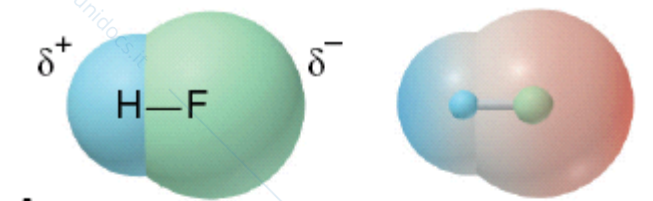
- **Mappa di densità elettronica di HI**

- Area blu - bassa d.e.
- Area rossa - alta d.e.



- **La separazione di carica è minore rispetto ad HF.**
- **HI è solo debolmente POLARE**

L'orientamento delle molecole polari in un campo elettrico

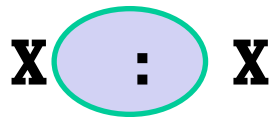


Scale di elettronegatività

Elemento	Allred-Rochow	Pauling	Mulliken
F	4,10	3,98	3,91
Cl	2,83	3,16	3,00
Br	2,74	2,96	2,74
I	2,21	2,66	2,21
C	2,50	2,55	2,63
N	3,07	3,04	3,03
O	3,50	3,44	3,17

Legame covalente polare

Passaggio dal legame covalente al legame ionico



Legame covalente
simmetrico

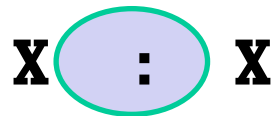


Legame ionico

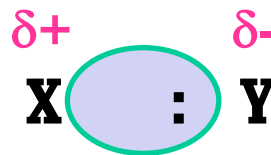
Legame covalente polare

Tra il legame covalente e il legame ionico c'è il legame covalente polare dove c'è una distribuzione elettronica non simmetrica.

Il simbolo δ indica una carica parziale, sia positiva ($\delta+$) per gli atomi poveri di elettroni, sia negativa ($\delta-$) per gli atomi ricchi di elettroni



**Legame covalente
simmetrico**



**Legame covalente
polare**

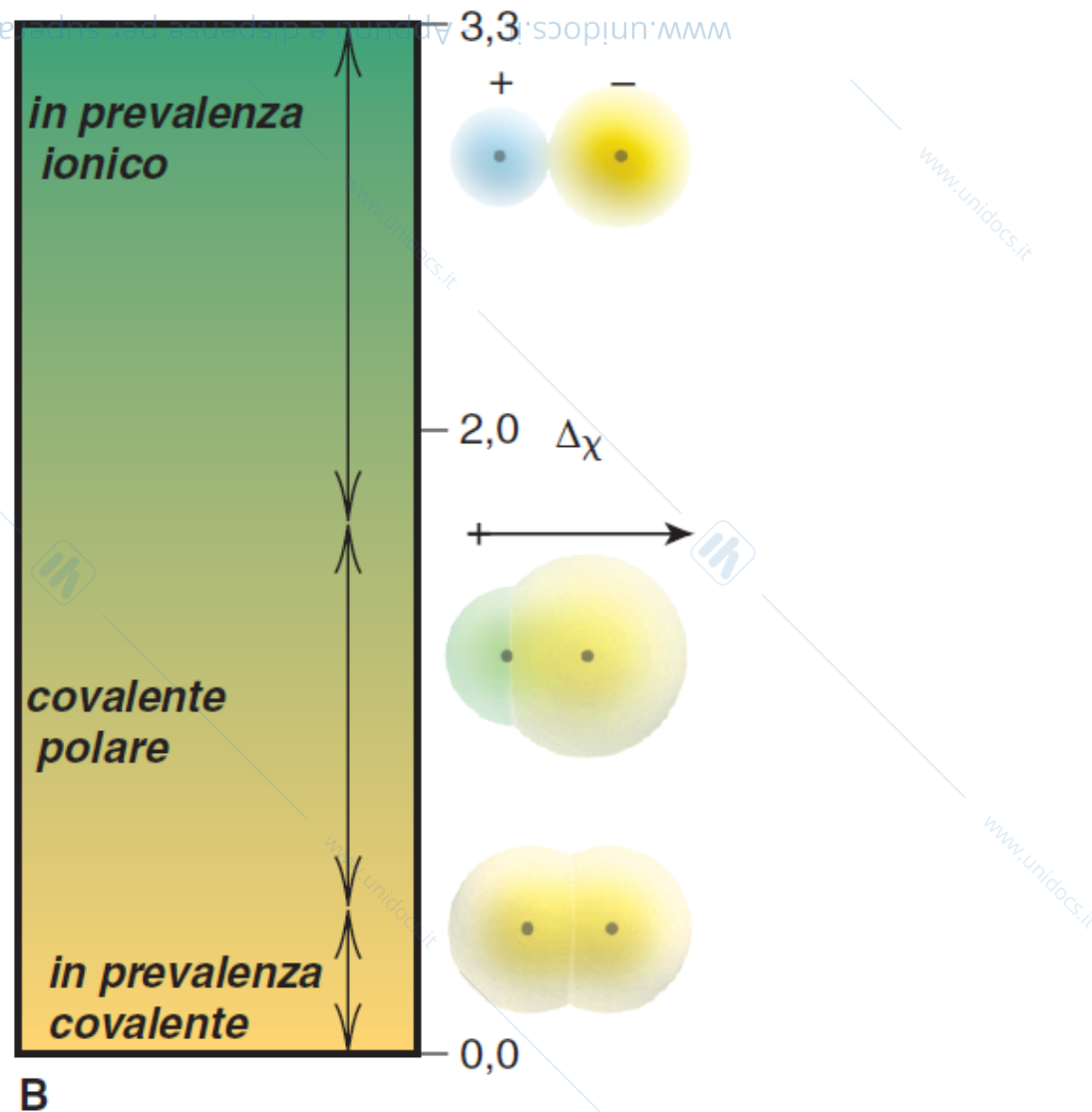


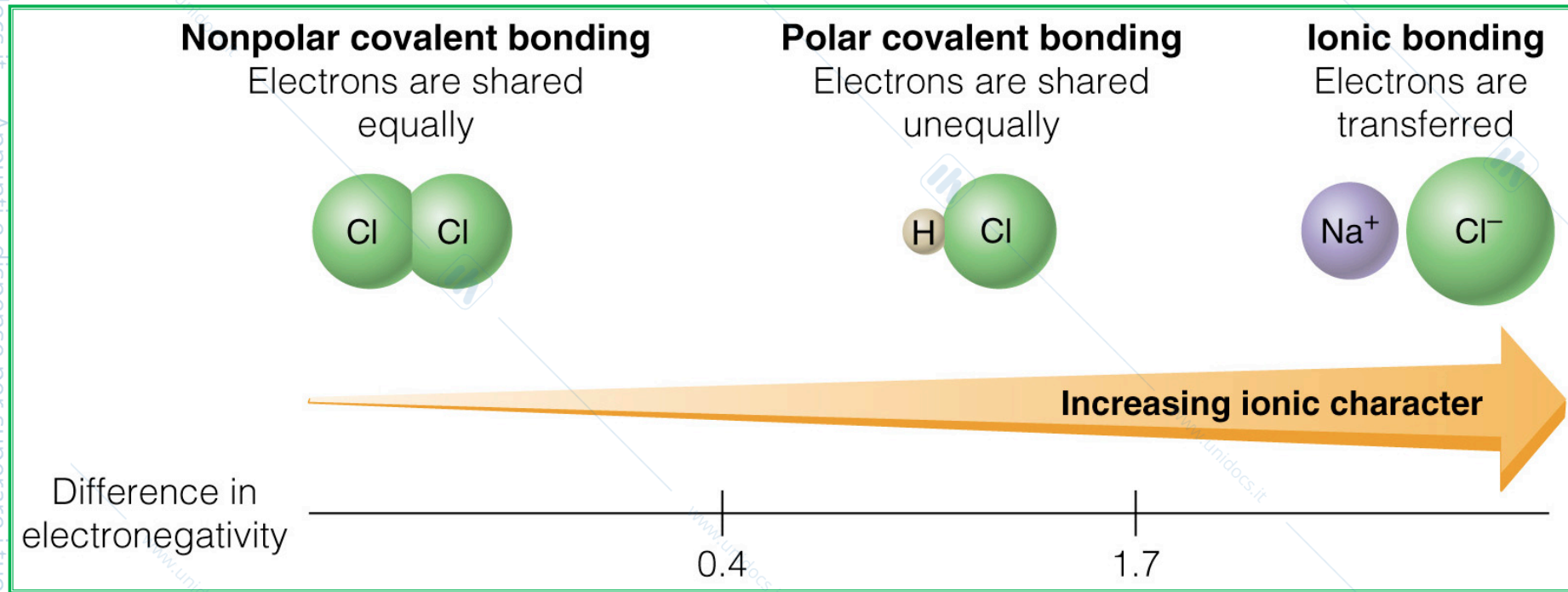
Legame ionico

Intervalli di legame per classificare il carattere ionico dei legami

I legami covalenti polari sono molto più comuni sia dei legami puramente ionici che di quelli puramente covalenti.

$\Delta\chi$	CARATTERE IONICO
$>1,7$	in prevalenza ionico
$0,4 \div 1,7$	covalente polare
$<0,4$	in prevalenza covalente
0	covalente apolare





Dal concetto delle cariche parziali positive e negative su parti opposte di una molecola deriva una proprietà molto importante delle molecole

La POLARITA'

Le molecole infatti possono essere polari o non polari (apolari)

Dato un sistema di cariche, il *momento di dipolo*, è una grandezza vettoriale che quantifica la separazione tra le cariche positive e negative, ovvero la polarità del sistema, e si misura in Coulomb per metro (SI).

Quando si ha a che fare con cariche molto piccole e prossime l'una all'altra, come per esempio nelle molecole, l'unità di misura SI (coulomb per metro), è troppo grande.

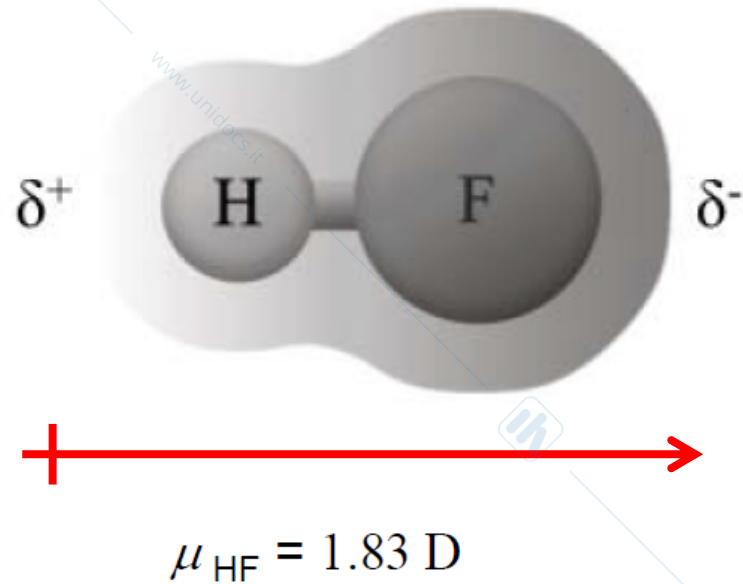
Nello studio delle proprietà elettriche delle molecole si preferisce così usare il debye.

il momento di dipolo elettrico H_2O

$$\text{SI} = 6,17 \cdot 10^{-30} \text{ C}\cdot\text{m}, \Rightarrow 1,85 \text{ D.}$$

$$\text{Conversione } 1 \text{ D} = 3.336 \cdot 10^{-30} \text{ C}\cdot\text{m.}$$

DIPOLO



Ad esempio nella molecola H-F, poiché il fluoro ha una maggiore tendenza ad attirare la coppia di elettroni del legame si genera un dipolo. Questa separazione di carica viene rappresentata con una freccia con un segno positivo sulla coda, il quale indica che il lato sinistro (δ^+) della molecola possiede una parziale carica positiva e che il lato destro della molecola ha una parziale carica negativa (δ^-).

La presenza di legami polari non è l'unico requisito affinché una molecola sia polare, ci sono infatti alcune molecole non polari che hanno legami polari (CO₂)

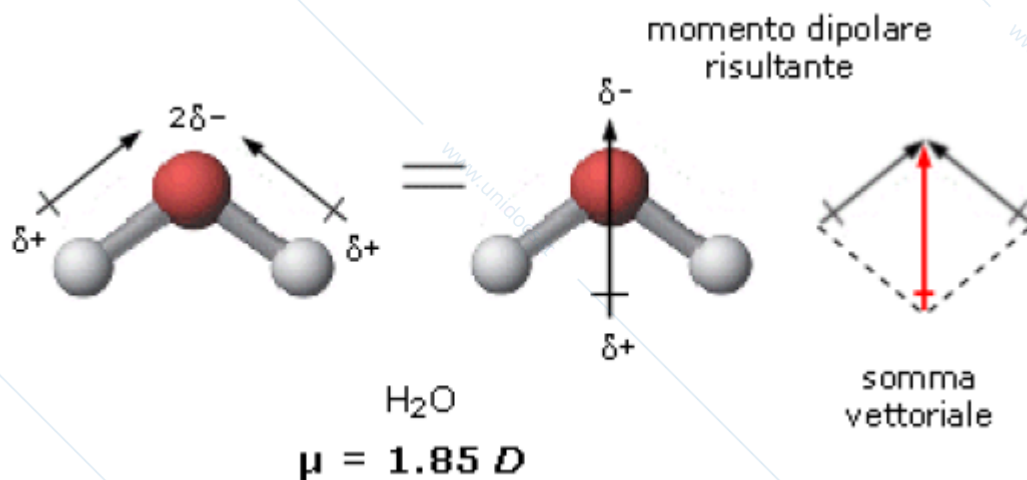
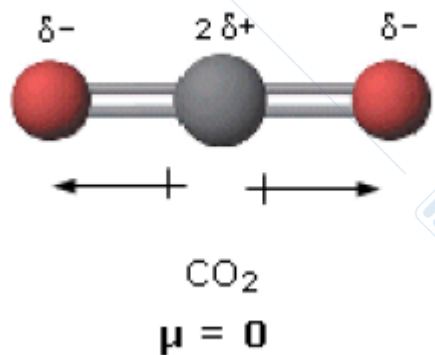
Come si determina la polarità di una molecola?

Perché una molecola sia polare devono valere 2 condizioni

1. DEVE ESISTERE ALMENO UN LEGAME POLARE

2. I LEGAMI POLARI, SE SONO PIÙ DI UNO, DEVONO ESSERE DISPOSTI IN MODO CHE I MOMENTI DI DIPOLO DI LEGAME NON SI CANCELLINO A VICENDA

In una molecola triatomica, se ci sono due legami polari, i relativi momenti di dipolo si sommano vettorialmente e possono quindi annullarsi a vicenda oppure no

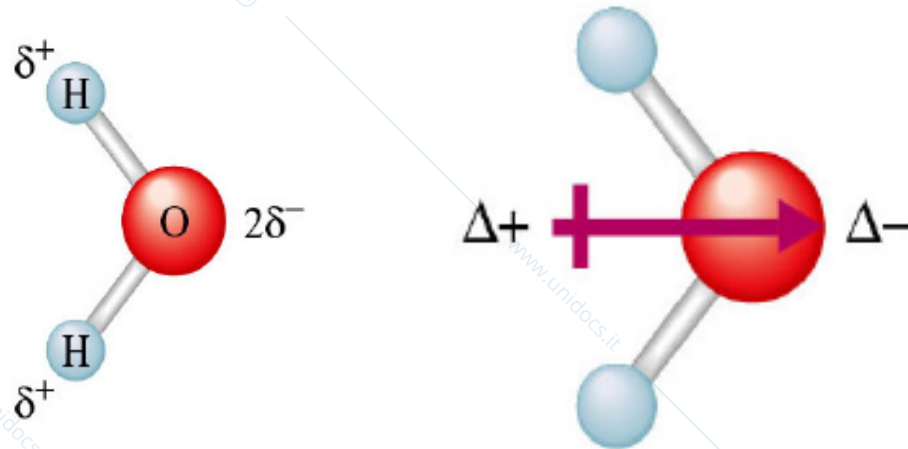


Il momento dipolare misura la polarità delle molecole

Quando i centri di massa delle cariche positive e negative sono separati la molecola possiede **momento dipolare (μ)**

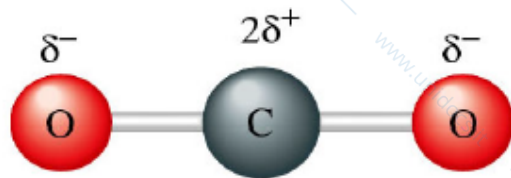
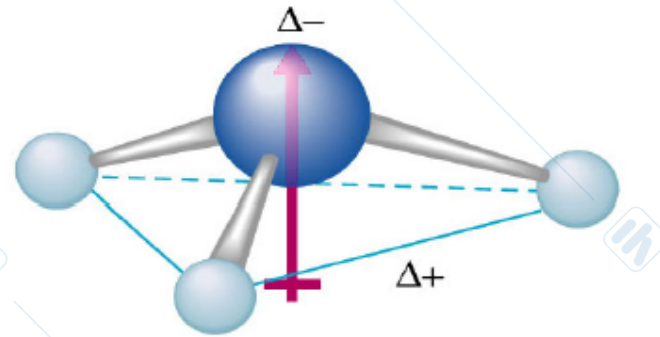
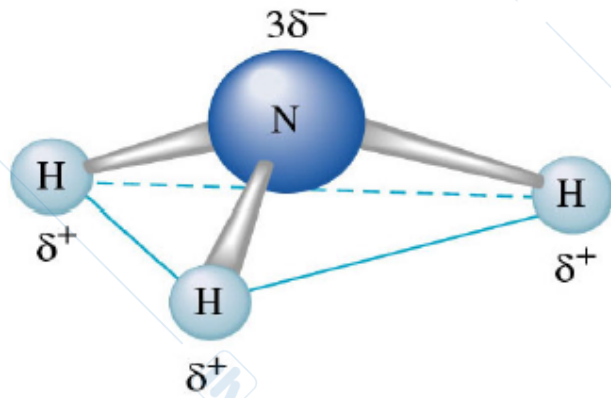
$$\mu = q \times r$$

$$1 \text{ Debye} = 3.336 \times 10^{-30} \text{ Cm}$$



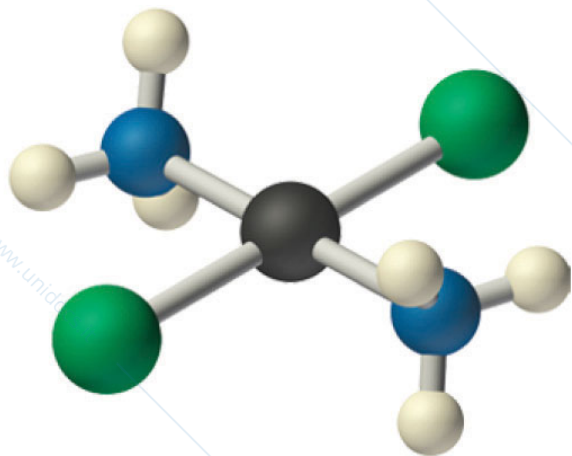
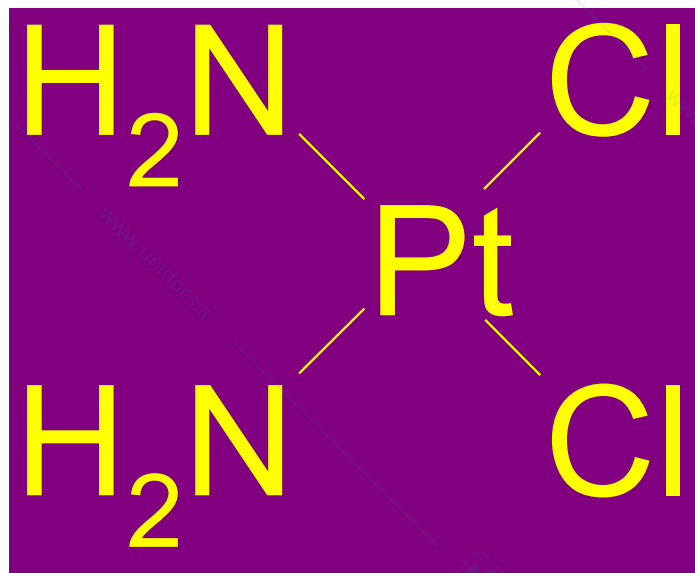
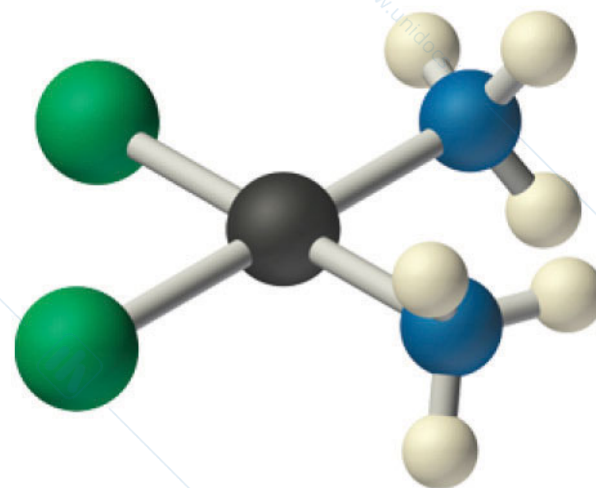
$$\mu = 1,85 \text{ D}$$

- La geometria e la simmetria molecolare giocano un ruolo chiave nel determinare μ

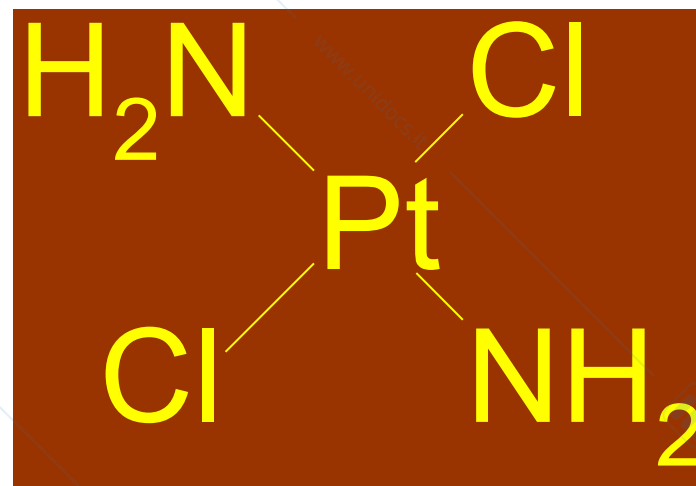


- I dipoli si sommano vettorialmente, molecole simmetriche hanno $\mu = 0$

Cis-dicloro-diamminoplatino



Trans-dicloro-diamminoplatino



TEORIA VB – Orbitali ibridi

PAULING 1930 - 1940

Valence Bond



Linus Pauling (1901-1994)

Si forma un legame covalente quando gli orbitali di due atomi si *sovrappongono* e una coppia di elettroni occupa la regione di sovrapposizione.

La zona di sovrapposizione degli orbitali può essere occupata da un *massimo di due elettroni* che devono avere *spin opposti (antiparalleli)*.

Maggiore la sovrapposizione degli orbitali, più forte il legame.

L'entità della sovrapposizione dipende dalla forma e dall'orientazione degli orbitali.

TEORIA VB – Orbitali ibridi

PAULING 1930 - 1940

Gli orbitali atomici di valenza nella molecola sono *diversi* da quelli negli atomi isolati.

Se non ci fossero variazioni non potremmo spiegare le forme molecolari che si osservano.

Gli orbitali atomici “si mescolano”: il processo di mescolamento è detto *ibridazione* e i nuovi orbitali atomici sono detti *orbitali ibridi*.

Gli orientamenti spaziali di questi nuovi orbitali danno origine a legami più stabili e sono compatibili con le forme molecolari osservate.

Gli orbitali ibridi

Gli orbitali atomici sono le funzioni che rappresentano soluzioni dell'equazione d'onda.

Come avviene per qualsiasi equazione differenziale, ogni combinazione lineare delle singole soluzioni dell'equazione d'onda rappresenta una soluzione valida dell'equazione stessa

Gli orbitali ibridi

Se ψ_1 , ψ_2 , ψ_3 sono tre soluzioni dell'equazione d'onda anche la funzione ibrida

$$\psi_{\text{ibr}} = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 + a_3\psi_3$$

con a_1 , a_2 , a_3 coefficienti arbitrari, rappresenta anch'essa una soluzione valida dell'equazione d'onda. a_1 , a_2 , a_3 **DEVONO** soddisfare la condizione

$$\sum_i a_i^2 = 1$$

Le proprietà sferiche degli orbitali s garantiscono di poter ottenere soluzioni a simmetria sferica

Le proprietà direzionali degli orbitali p e d consentono di ottenere orbitali ibridi orientati verso qualsiasi direzione