

**Appunti tratti dal corso di Chimica tenuto dalla
prof.ssa E. Vismara per gli studenti dei D.U. in
Ing. Elettronica, Informatica, Biomedica, delle Telecomunicazioni
A.A. 1999-2000**

1. Strutture atomiche e molecolari.



La **chimica** è una scienza sperimentale e quantitativa. La chimica *sintetica* si occupa della conversione delle sostanze, la chimica *organica* descrive invece le sostanze esistenti ed i fenomeni ad esse associati.

Per *teoria* si intende la generalizzazione di un fenomeno.

Una *trasformazione* è una modifica di una o più grandezze fisiche. Si consideri ad esempio la trasformazione del ghiaccio in acqua o dell'acqua in vapore; questi passaggi comportano una modifica dello stato di aggregazione della materia (solido, liquido, gas). Le molecole dei solidi sono molto legate fra di loro, per cui possiedono un'alta energia potenziale mentre hanno energia cinetica pressoché nulla. Nei liquidi le molecole sono maggiormente libere le une rispetto alle altre per cui tra di esse vi sarà sia energia *potenziale* (che esprime un'energia di legame), sia energia *cinetica* (che esprime un'energia di movimento). Nei gas il grado di libertà di movimento delle molecole è massimo per cui esse possiederanno unicamente energia cinetica. Definendo la temperatura come un numero attraverso cui si esprime l'energia cinetica della materia, si può notare che lo stato di aggregazione è strettamente dipendente dalla temperatura.

Il cambiamento di stato è però una trasformazione *reversibile* e quindi è un fenomeno fisico. Le proprietà fisiche riguardano tutto ciò che non modifica l'identità chimica di una sostanza, mentre le reazioni chimiche riguardano una modifica chimica della materia.

Teoria base della chimica.

La materia è costituita da atomi e da energia radiante.

Dalton (1803-1807).

Gli elementi costitutivi dell'atomo sono protoni, neutroni ed elettroni.

	MASSA	CARICA
PROTONE	$1,67 \cdot 10^{-24} \text{ g}$	$+1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
NEUTRONE	$1,67 \cdot 10^{-24} \text{ g}$	neutro
ELETTRONE	$9,11 \cdot 10^{-28} \text{ g}$	$-1,6 \cdot 10^{-19} \text{ C}$

	ATOMO
MASSA	$\sim 10^{-23} \text{ g}$
VOLUME	$\sim 10^{-22} \text{ cm}^3$
DIAMETRO	100~500 pm

	NUCLEO
DIAMETRO	$\sim 10^{-2} \text{ pm}$
DENSITA'	$10^{13} \sim 10^{14} \text{ g/cm}^3$

N.B. $d(\text{H}_2\text{O}) = 1 \text{ g/cm}^3$

Lo spazio è "occupato" principalmente dal vuoto, mentre la materia è concentrata nel nucleo. Si definisce carica nucleare Z il numero di protoni presenti in un atomo. Mentre il numero di elettroni e neutroni può variare in atomo dello stesso tipo (nel secondo caso si parla di isotopi), il numero di protoni non viene alterato se non

nelle reazioni nucleari poiché essi possiedono una energia di legame molto elevata che rende il loro utilizzo incompatibile con la vita. Nelle reazioni chimiche intervengono invece unicamente gli elettroni che, possedendo bassa energia di legame sono compatibili con la vita (gli elettroni ruotano attorno al nucleo).

Effetto fotoelettrico.

Si osserva che relativamente ai metalli si può individuare un raggio monocromatico di frequenza f che permette l'estrazione di elettroni (e^-). Ogni metallo ha una frequenza minima di estrazione, questo valore di soglia è tipico per ogni metallo.

Teoria quantistica.

La luce viaggia secondo pacchetti di energia chiamati fotoni.

$$E_{\text{fotone}} = h \cdot f$$

h è la costante di Plank: $h = 6,63 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$

Affinché l'elettrone riesca a distaccarsi dal metallo la frequenza del raggio luminoso deve essere sufficiente a fornire un'energia che permetta di rompere il legame elettrone-nucleo. L'energia dell'elettrone emesso è quantificabile come energia cinetica di valore:

$$E_{\text{cinetica}} = h \cdot f - E_{\text{legame}}$$

L'effetto fotoelettrico è un effetto limite e dimostra l'interazione tra luce ed elettroni. Lo spettro di assorbimento è una serie di righe che esprimono l'interazione tra la luce e la materia e si basa sul principio che ogni singolo elettrone assorbe onde elettromagnetiche di ben determinate frequenze, diverse da un elettrone all'altro. Lo spettro di emissione si basa invece sul principio che gli atomi acquisendo del calore emettono onde luminose. Si capisce dunque quanto l'interazione materia-energia sia molto stretta.

Modello dell'atomo di idrogeno secondo Bohr.

Bohr intuì che l'elettrone dell'atomo di H ruotasse attorno al nucleo seguendo orbite circolari di raggio r . Il valore del raggio non è un numero continuo ma quantizzato; infatti:

$$r = n^2 \cdot 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$$

Dove n si chiama numero quantico principale ($n = 1, 2, 3, \dots, \infty$). L'elettrone in stato di quiete si trova in una posizione di equilibrio valida per $n=1$, quando riceve dell'energia sotto forma di calore l'elettrone salta di orbita ($n = 2, 3, \dots$) ma non può assolutamente fraporsi tra un'orbita e l'altra. Più si vuole distanziare l'elettrone dal nucleo più energia gli si deve fornire. Lo spettro di emissione dipende appunto dal passaggio dell'elettrone da un'orbita interna ad una esterna per effetto del calore. Affinché l'elettrone si allontani dal nucleo è necessario fornire dell'energia (luminosa o termica) mentre quando la sorgente di energia cessa il suo lavoro l'elettrone cade sino all'orbita più interna, restituendo l'energia prima acquisita sotto forma di luce. Il raggio più interno è molto vicino al nucleo e la distanza aumenta sempre più secondo un andamento quadratico. L'energia di legame di un elettrone può essere quantificata dalla formula:

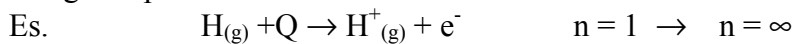
$$E_n = -R_H \frac{1}{n^2}$$

dove R_H è la costante di Rydberg relativa all'idrogeno ($R_H = 2,18 \cdot 10^{-12}$). L'energia di legame si considera negativa poiché da un punto di vista esterno ci si deve opporre a tale energia per sottrarre un elettrone. Il modello di Bohr interpreta quantitativamente le

righe spettrali. Se si volesse quantificare la differenza di energia tra due elettroni situati su orbite differenti avremmo:

$$\Delta E = E_f - E_i = -\frac{R_H}{n_f^2} - \left(-\frac{R_H}{n_i^2} \right) = R_H \left(\frac{1}{n_i^2} - \frac{1}{n_f^2} \right) = h \cdot f$$

L'energia necessaria per sottrarre completamente un elettrone al proprio atomo è detta energia di prima ionizzazione.



Il modello di Bohr è valido solo per l'atomo di idrogeno e per gli ioni monoelettronici (He^+ , Li^{++} , ecc.).

La **meccanica quantistica** (o ondulatoria) permette di costruire tutte le strutture elettroniche in accordo con i dati sperimentali tipo spettri di emissione o di assorbimento.

- L'energia radiante è discontinua: $E_{fotone} = h \cdot f$
- L'energia radiante ha massa: $E = m \cdot C^2$

Dove C è la velocità della luce: $3 \cdot 10^8$ m/s

Il fotone viene dunque considerato come un corpuscolo avente massa propria.

$$m_{fotone} = \frac{h}{\lambda \cdot C}$$

La materia (ogni oggetto di massa m) in condizioni opportune (l'oggetto deve essere in movimento) manifesta proprietà ondulatorie, per cui possiederà ad una certa velocità v una lunghezza d'onda λ .

$$E = h \cdot f = m \cdot v^2$$

La frequenza è legata alla lunghezza d'onda dalla relazione: $f = v/\lambda$

$$\lambda = \frac{h}{m \cdot v}$$

Il prodotto massa per velocità è la quantità di moto p del corpo considerato; si dice che il corpo di massa m e velocità v genera un'onda di materia, in particolare la genera anche l'elettrone che avrà una sua lunghezza d'onda caratteristica.

$$v_e = 5,97 \cdot 10^6 \text{ m/s}$$

$$m_e = 9,11 \cdot 10^{-23} \text{ g}$$

$$\lambda_e = 1,22 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

L'elettrone ha lunghezza d'onda pari a $1,22 \text{ \AA}$ e si dice che la sua onda è stazionaria poiché ruota su un'orbita chiusa di lunghezza multipla della lunghezza d'onda dell'elettrone:

$$2\pi r = n \cdot \lambda = \frac{n \cdot h}{m \cdot v} \quad (n \in \mathbb{N})$$

Il modello atomico di Shrodinger descrive l'atomo tenendo conto della materia e delle sue proprietà ondulatorie attraverso un'equazione matematica. Le soluzioni dell'equazione di Shrodinger sono del tipo $\Psi(n,m,l)$ dove n, m ed l sono dei parametri fisici che indicano una zona dello spazio dove si trova l'elettrone. La soluzione Ψ è detta orbitale o funzione d'onda. Il quadrato della funzione d'onda indica la probabilità di trovare un elettrone in un certo punto. Si capisce che le probabilità di trovare un

elettrone in un punto infinitamente lontano dal nucleo dell'atomo sono nulle (i), mentre la probabilità è massima quando lo si cerca nel volume occupato dall'atomo (ii).

i) $\Psi_{\infty}^2 \rightarrow 0$

ii) $\iiint \Psi^2 dv = 1$

I parametri n, m, l sono chiamati numeri quantici e ciascuno indica una caratteristica dell'orbitale:

- $n = 1, \dots, 7$ indica la dimensione dell'orbitale, il suo livello energetico e la distribuzione degli elettroni nello spazio;
- $l = 0, \dots, n-1$ indica la forma della distribuzione degli elettroni;
- $m = -l, \dots, 0, \dots, +l$ indica l'orientamento della distribuzione;

Vi è anche un quarto numero quantico detto numero di spin: $s = \pm 1/2$; questo indica il verso di rotazione dell'elettrone attorno al proprio asse. L'orbitale è una zona dello spazio con una forma ed un orientamento; due elettroni possono stare nello stesso orbitale grazie al fatto che ruotano su sé stesse in senso opposto e, due corpi carichi elettricamente di segno concorde che ruotano in sensi opposti, generano un campo magnetico che li attrae. Ogni orbitale (volume geometrico) può ospitare solo due elettroni.

Principio di indeterminazione di Heisenberg.

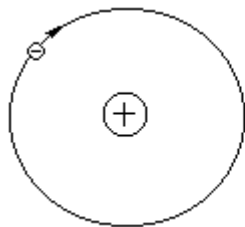
Non si può conoscere con la stessa approssimazione energia e posizione di un elettrone.

$$\Delta p \cdot \Delta r \geq \frac{1}{2\pi}$$

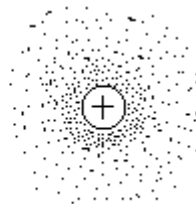
$$\Delta v \cdot \Delta r \geq \frac{h}{2\pi \cdot m}$$

più la massa del corpo in movimento è piccola più grande sarà l'incertezza; il principio di indeterminazione è comunque verificato per ogni corpo di massa m in movimento. A questo punto è appropriato sostituire il modello planetario dell'atomo in cui si rappresenta l'orbita dell'elettrone, con il sistema quanto-meccanico basato sul fatto che non si può conoscere dove si trova con precisione l'elettrone ma solo la zona dello spazio in cui si hanno le maggiori probabilità che vi sia.

SISTEMA PLANETARIO

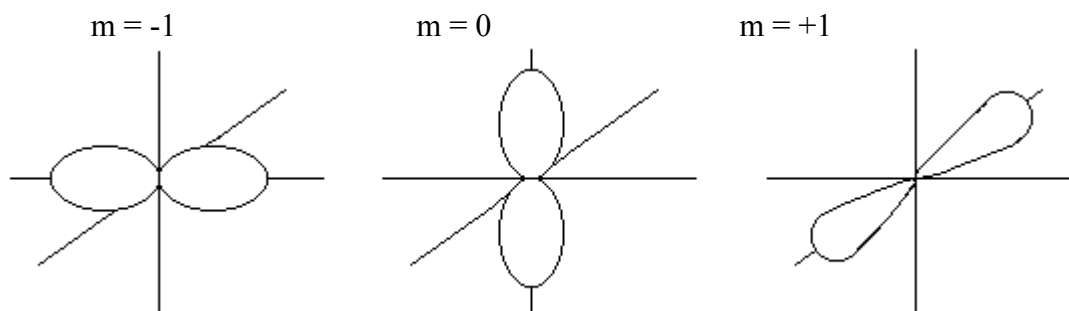


SISTEMA QUANTO-MECCANICO



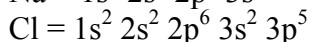
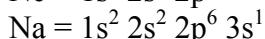
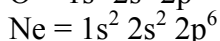
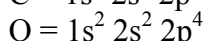
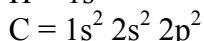
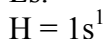
Il sistema quanto-meccanico mette in evidenza la distribuzione della densità elettronica o meglio la densità della probabilità che vi sia la presenza di un elettrone.

Per $l=0$ si avrà un orbitale sferico che dunque non avrà alcun orientamento; invece per $l>0$ avremo degli orbitali composti da due lobi opposti che dunque potranno avere tre diversi orientamenti ($m=-1$; $m=0$; $m=+1$).

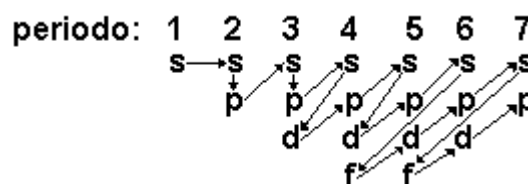


La costruzione della configurazione elettronica degli atomi multielettronici dipende dall'energia propria di ogni orbitale: $E = f(n, l)$ dove $l = s, p, d, f$. Gli atomi in quiete sono nello stato fondamentale che corrisponde alla configurazione elettronica con gli elettroni negli orbitali di energia più bassa. Il legame chimico interessa gli elettroni esterni detti di valenza, sono questi elettroni che permettono ai nuclei di diversi atomi di mantenere un legame. Gli elettroni di valenza sono quelli più esterni. La simbologia di Lewis mette in evidenza questi elettroni per ogni atomo.

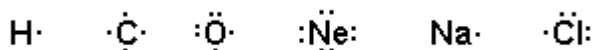
Es.



Schema rappresentante lo riempimento elettronico:



Simbologia di Lewis:



Nella tavola periodica i periodi (o livelli) corrispondono alle righe, mentre i gruppi corrispondono alle colonne. All'interno di ogni singolo gruppo si trovano elementi somiglianti poiché hanno stesso numero e stesso tipo di elettroni di valenza. Gli elementi del I gruppo A si dicono alcalini, quelli del II gruppo alcalino-terrosi; gli elementi dell' VIII gruppo sono invece i gas nobili che, avendo l'orbita esterna completa, sono caratterizzati dalla totale assenza di reattività chimica.

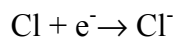
Regola dell'ottetto.

Gli atomi reagiscono tra di loro per arrivare alla configurazione dei gas nobili.

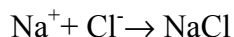
Es.



Per arrivare alla configurazione del neon il sodio deve cedere un elettrone divenendo così uno ione positivo.



Per giungere alla configurazione dell'argo il cloro deve invece acquistare un elettrone diventando uno ione negativo.

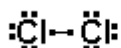


Gli ioni Na^+ e Cl^- formano il cloruro di sodio.

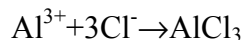
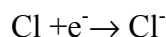
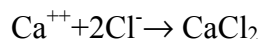
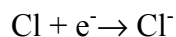
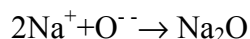
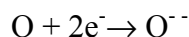
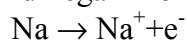
Nel legame ionico vi è il passaggio di uno o più elettroni da un atomo all'altro cosicché gli atomi non siano più di carica neutra. Nei legami chimici ionici intervengono i metalli che cedono elettroni per diventare ioni positivi, ad esempio reagendo con l'ossigeno o

con gli elementi del VII gruppo A i cui elementi sono detti alogeni. I metalli non reagiscono tra di loro ma si legano ad altri atomi solo con legami ionici. Se i metalli per giungere ad ottetto completo devono cedere elettroni, i non metalli devono invece acquistarli in modo tale da completare l'ottetto. Oltre al legame ionico vi è anche il legame covalente, solitamente si verifica tra non metalli o tra un non metallo e l'idrogeno. In questo tipo di legame c'è una condivisione di elettroni tra due atomi adiacenti, viene così a formarsi un nuovo orbitale chiamato orbitale molecolare. I legami covalenti possono anche dar luogo a particolari strutture reticolari in cui non sono individuabili distintamente le molecole. Ci sono alcuni elementi che si trovano in natura nello stato di molecole biatomiche.

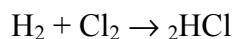
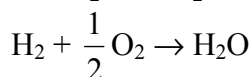
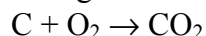
Es.



Esempi di legami ionici:



Esempi di legami covalenti:



L'energia posseduta da un elettrone non dipende solo dal periodo ma anche dalla forma dell'orbitale. Questo è dimostrato dall'ordine degli elementi nella tavola periodica, si noti che gli atomi con una configurazione elettronica terminante con l'orbitale 3d non si trovano sul terzo livello ma sul quarto, lo stesso si può notare per i 4d, 5d e 6d. Questo si verifica perché la sfera di tipo 4 ha un'energia più bassa dell'orbitale 3d per cui questo si riempie prima, poiché vale la regola generale per cui si riempiono prima gli orbitali di energia più bassa. Tutti i metalli con orbitale esterno di tipo d sono metalli di transizione che hanno ancora carattere metallico e si assomigliano tutti, anche se non sono dello stesso gruppo poiché la differenza di energia degli orbitali non è tale da differenziarne il comportamento chimico.

Sottolivelli. A parità di periodo gli orbitali meno schermati sono gli s poi gli p, gli d e gli f.

Il concetto di schermo dipende dal fatto che gli elettroni più esterni "vedono" la carica nucleare schermata dagli elettroni più interni. L'effetto schermo è quantificabile se si considera S come lo schermo che gli elettroni esercitano sull'elettrone preso in

considerazione. A questo punto ogni elettrone percepirà l'influenza della carica nucleare non interamente ma solo in parte:

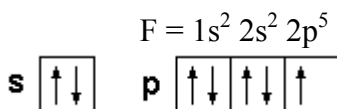
$$Z_{\text{efficace}} = Z - S$$

Principio di esclusione di Pauling.

In un atomo ogni elettrone differisce dagli altri per almeno un numero quantico.

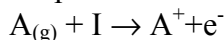
La regola di Hund determina lo riempimento degli orbitali elettronici, mettendo in evidenza gli spin dei singoli elettroni. Gli elettroni tendono prima ad occupare tutti gli orbitali equipotenziali disponibili, poi si appaiano sfruttando i fenomeni elettromagnetici.

Es.

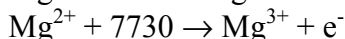
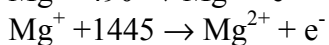
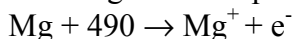


Ogni riquadro rappresenta un orbitale e frecce di verso opposto indicano il valore dello spin.

L'energia di prima ionizzazione è l'energia necessaria per sottrarre ad un atomo allo stato gassoso un elettrone. L'energia di prima ionizzazione si indica con la lettera I:



Gli elementi godono di alcune proprietà periodiche, una di queste è che tendenzialmente l'energia di prima ionizzazione I aumenta lungo i periodi e diminuisce lungo i gruppi. Se consideriamo i gruppi questo fenomeno è spiegabile pensando che se non ci fosse l'effetto schermo gli elettroni si dovrebbero sottrarre dall'atomo di appartenenza tutti con la stessa energia. Lungo il periodo invece lo schermo ha poca importanza poiché tra elettroni vicini lo schermo è più basso per cui conta la distanza dalle cariche nucleari. Naturalmente vi sono delle irregolarità nell'osservazione di questo fenomeno ma ciò non influisce sul giudizio qualitativo. Un'altra proprietà periodica riguarda le dimensioni dell'atomo. L'effetto schermo si ripercuote anche su di esse in quanto il raggio atomico aumenta con il gruppo e diminuisce con le righe (ad eccezione dei gas nobili). Gli elettroni esterni sono quelli implicati nei legami ed hanno bassa energia di ionizzazione. Se si osserva l'energia di prima, seconda e terza ionizzazione del magnesio (Mg) si noterà che tra la seconda e la terza esiste un divario molto maggiore che tra la prima e la seconda, questo accade perché nell'estrazione del terzo elettrone per ottenere lo ione Mg^{3+} si deve passare dall'orbitale 3s a quello 2p.



L'elettronegatività esprime la tendenza di un atomo ad attirare elettroni relativamente ad un altro atomo presente nella stessa molecola. L'elettronegatività è un numero puro perché rappresenta solo una tendenza e non una misura diretta. La scala di elettronegatività va da 1 a 4. La polarità di un legame A-B dipende dalla differenza di elettronegatività tra gli atomi A e B. In un legame di tipo A-A (tra atomi uguali) la differenza di elettronegatività è nulla per cui il baricentro delle cariche si trova al centro della molecola, di conseguenza la densità elettronica è uniforme. In un legame A-B se l'elettronegatività di A e B sono confrontabili la polarità è diversa da 0 per cui il legame è covalente polare; il baricentro sarà spostato e la densità di carica non sarà uniforme. Se invece la differenza di elettronegatività è molto alta c'è addirittura un passaggio di elettroni in modo che si crei un legame ionico (ad es. tra Li e F) siccome uno dei due

atomi prevale talmente sull'altro da prelevare totalmente una doppietta elettronica. Sotto questa ottica il legame ionico non è altro che un estremo del legame covalente. Se il legame è covalente polare si parla di percentuale di ionicità, visto lo spostamento di cariche. La percentuale di ionicità dipende da quanto il doppietto elettronico si sposta verso l'atomo più elettronegativo, ma su questo torneremo in seguito. I composti ionici sono per lo più solidi, questo accade perché il legame ionico è un legame elettrostatico che porta alla formazione di un reticolo cristallino con ioni in posizione fissa ad una distanza ideale per il legame elettronico. Un reticolo cristallino è una struttura caratterizzata da un ordine molto elevato formato da unità costruttive (celle elementari) che si ripetono nelle tre dimensioni. In questo modo la carica degli ioni viene dispersa lungo il reticolo in un'alternanza di ioni positivi e ioni negativi.

Forme molecolari.

V.S.E.P.R. – Teoria della repulsione delle coppie elettroniche dello stato di valenza in fase gas.

Questa teoria esprime la repulsione tra doppietti elettronici presenti negli orbitali molecolari dei legami covalenti. Attraverso di essa si possono trarre regole generali sulla forma delle diverse molecole. Non è possibile utilizzare questa teoria per i composti ionici. Considerando A come l'atomo centrale della molecola si hanno le seguenti possibilità:

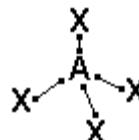
Formula: AX_2 Angolo: 180°
es. $BeCl_2$



Formula: AX_3 Angolo: 120°
es. BF_3



Formula: AX_4 Angolo: $109,5^\circ$
es. CH_4 (metano); SiH_4



In realtà la molecola BF_3 è un'eccezione alla regola dell'ottetto poiché il boro (III gruppo) necessita di 5 legami per completare l'ottetto. La V.S.E.P.R. non tiene conto solo dell'esistenza di un legame ma anche di coppie elettroniche, in quanto anche esse possono occupare vertici delle strutture geometriche.

NH_3 (ammoniaca)  $107,3^\circ$

H_2O  $104,5^\circ$

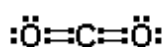
L'azoto è del V gruppo A per cui nell' NH_3 vi saranno 3 legami ed una doppietta di elettroni libera. Ciò comporta che la molecola sia a forma tetraedrica in cui il vertice è occupato dal doppietto non condiviso. L'ossigeno è invece del VI gruppo A per cui nell'acqua vi saranno due legami e due doppietti non condivisi che occuperanno due vertici del tetraedro irregolare. La densità elettronica del doppietto non condiviso è

maggiore rispetto ai doppietti condivisi a tal punto da deformare il tetraedro espandendolo, ovvero allontanandone i vertici rispetto alla propria posizione. Nell'acqua (con 2 doppietti non condivisi) la situazione è ancora più estrema che nell'ammoniaca infatti l'angolo acuto $\text{H}\hat{\text{O}}\text{H}$ è inferiore all'angolo caratteristico dell' NH_3 . La teoria della repulsione elettronica afferma infatti:

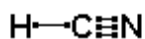
massima repulsione \rightarrow doppietto libero – doppietto libero
 media repulsione \rightarrow doppietto libero – legame
 minima repulsione \rightarrow legame – legame

Ci sono delle molecole in cui sono presenti legami doppi, ed in cui non è immediato individuare l'atomo centrale, per quest'ultime si deve individuare l'atomo che necessita di più legami per completare l'ottetto.

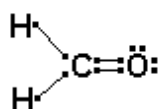
CO_2



HCN (acido cianidrico)



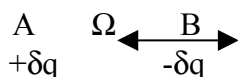
H_2CO



$\text{HCH}=116^\circ$; $\text{HCO}=122^\circ$

Il carbonio è l'atomo caratterizzato da più probabilità di legame covalente poiché si trova al centro della tavola periodica. E' conferma di questo il fatto che il C è l'elemento base dei polimeri che hanno infinite probabilità di legami covalenti. Un legame doppio o triplo di considera come un solo gruppo di elettroni che si legano all'atomo centrale. I legami multipli hanno una densità di carica elettronica maggiore di quella dei legami singoli covalenti.

Si definisce dipolo un legame chimico covalente tra due atomi di elettronegatività diversa. La differenza di densità elettronica si indica con $+q$ e $-q$. Il generico legame dipolo si può schematizzare nel seguente modo:



dove Ω rappresenta la distanza tra i nuclei dei diversi atomi. Si può così individuare un momento dipolare dato dal legame:

$$\mu = \delta q \cdot \Omega$$

Il momento dipolare di un legame covalente puro è nullo, poiché nulla è la differenza di elettronegatività. Possiamo ottenere il grado di ionicità percentuale del legame dal rapporto tra δq e la massima carica che potrebbe spostarsi da un atomo all'altro che corrisponde poi alla carica di un elettrone.

Es. Nel caso del HCl abbiamo:

$$\mu = 3,6 \cdot 10^{-30} \text{ C} \cdot \text{m}$$

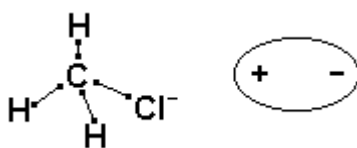
$$\Omega = 1,27 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

$$\delta q = \frac{\mu}{\Omega} = \frac{3,6 \cdot 10^{-30}}{1,27 \cdot 10^{-10}} = 2,8 \cdot 10^{-20} \text{ C}$$

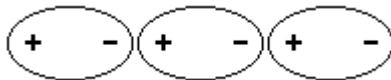
$$\frac{\delta q}{q_e} = \frac{2,8 \cdot 10^{-20}}{1,6 \cdot 10^{-19}} \cong 18\%$$

Come si hanno momenti dipolari μ per i singoli legami covalenti, si possono avere momenti dipolari per intere molecole, dati dalla somma vettoriale dei singoli momenti di legame. Il metano (CH_4 - tetraedro regolare) non è una molecola polare perché ogni singolo legame è polarizzato verso l'atomo centrale, i legami si compensano dunque l'uno con l'altro poiché la molecola è simmetrica. Le molecole con $\mu_{\text{TOT}} \neq 0$ sono dipoli permanenti rappresentabili con una parte positiva ed una negativa.

Es. CH_3Cl



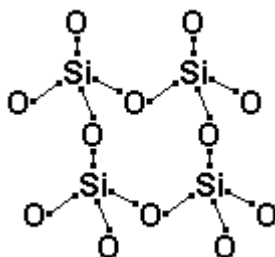
I composti molecolari a 25°C possono avere stato fisico differente (gassoso, liquido, solido), a seconda dello stato di aggregazione che è in funzione dei legami intermolecolari. Con la formazione di molecole polari si possono formare dei legami elettrostatici tra molecole differenti che si orientano in modo tale da formare legami intermolecolari.



Se le molecole sono totalmente apolari ($\mu = 0$) non avranno alcun vincolo l'una con l'altra per cui si troveranno allo stato gassoso. Se invece le molecole avranno μ molto alto si avranno dei solidi o, al più, dei liquidi. Il metano a 25°C è un gas mentre il CH_3Cl è liquido poiché questa molecola è un dipolo permanente. Il legame elettrostatico determina una diminuzione della libertà di movimento delle molecole. Solitamente caratteristiche come il punto di ebollizione di una sostanza sono in funzione della massa molecolare; questo non si verifica però nell'acqua che presenta caratteristiche ben al di sopra di quelle che ci potremmo aspettare osservando la sua massa molecolare. Questo dipende dal fatto che i legami intermolecolari nell' H_2O sono particolarmente forti a causa del legame a idrogeno, un particolare tipo di attrazione intermolecolare che si stabilisce tra l'atomo di idrogeno che partecipa ad un legame polare e l'atomo elettronegativo di una molecola contigua; questo può essere di tre diversi tipi, ognuno dei quali creerà un diverso momento di legame: N ($\mu=1$); O ($\mu=1,6$); F ($\mu=2,3$).

Per solido covalente (es. SiO_2) si intende un composto solido a 25°C in cui il legame covalente non dà origine ad una molecola. Mentre nella CO_2 i momenti dipolari si annullano a vicenda dando origine ad un gas, nel SiO_2 (vetro silice) questo non avviene perché non è una molecola né un gas, poiché il legame covalente si ripete regolarmente nello spazio, senza formare molecole ben definite. Il silicio è tetravalente (AX_4) quindi forma dei tetraedri regolari ripetuti nello spazio in cui ogni atomo di ossigeno è condiviso da due tetraedri.

Es. SiO_2



Il silicio non forma mai legami multipli come il carbonio poiché non è in grado di sopportare la repulsione di legami multipli, ne consegue che l'unico modo di completare il suo ottetto è formare tetraedri. La lunghezza dei legami varia a seconda che il legame sia singolo, doppio, triplo, ecc. Il legame singolo è il più lungo poiché lega con minor energia i nuclei.



- Composti covalenti:
 - non formano molecole;
 - solidi a 25°C;
 - reticoli covalenti (grafite, diamanti, ecc.).
- Composti metallici:
 - molecolari;
 - solidi a 25°C;
 - reticolo ionico;

I reticoli ionici sono tenuti insieme da orbitali molecolari delocalizzati, dove gli ioni di diverso segno di carica sono tenuti insieme da elettroni comuni. A temperature elevate (generalmente 1000÷1500°C) è anche possibile vaporizzare un sale ionico, ottenendo molecole ioniche finite (es. NaCl gassoso). Le proprietà generali dello stato cristallino sono quelle di un reticolo incompressibile, rigido, di forma geometrica regolare ed anisotropo. L'anisotropia è una caratteristica della materia per cui alcune proprietà fisiche (meccaniche, termiche, elettroniche,...) variano al variare della direzione d'applicazione della sollecitazione.