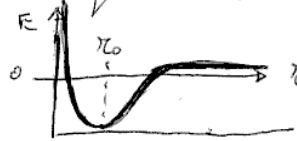
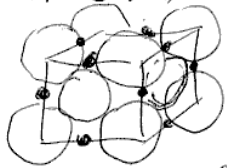


1) Legami ionici: (cos'è, tra quali atomi, come si organizzano, esempi)

Il legame ionico è un legame di tipo puramente elettrostatico tra ioni di carica opposta. Questi devono rimanere tali anche alle distanze di legame e quindi... devono avere una differenza di elettronegatività, tra loro, maggiore di 1,8 unità. Si dispongono in modo ordinato e ripetitivo per formare una struttura cristallina come NaCl composto da ioni  $\text{Na}^+$  e  $\text{Cl}^-$  che formano cristalli cubici nei quali gli ioni  $\text{Na}^+$  e  $\text{Cl}^-$  si alternano e così ogni ione  $\text{Cl}^-$  è circondato da 6 ioni  $\text{Na}^+$



ANDAMENTO DELL'ENERGIA  
NELLA FORMAZIONE  
DEL LEGAME COVALENTE

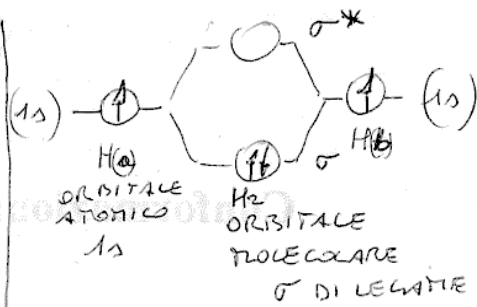
2) Legami covalenti (cos'è, tra quali atomi, di quanti tipi è, come si organizzano a livello microscopico)

Il legame covalente si realizza quando due atomi (come H) si avvicinano, sovrappongono i loro orbitali e mettono in comune due elettroni (uno ciascuno oppure uno due e l'altro nessuno). Se la differenza di E.N. è zero (atomi uguali come in  $\text{H}_2$ ) si ha un legame covalente non polare, se la differenza di E.N. è un po' più grande si hanno legami covalenti polari fino al limite di 1,8 di E.N. oltre il quale si hanno legami ionici. La geometria delle molecole formate può essere dedotta anche con teorie molto semplici come la VSEPR che ha solo considerazioni di tipo geometrico considerando le coppie elettroniche di legame e di non legame attorno all'atomo centrale. Le varie molecole hanno al loro interno forti legami covalenti, ma tra molecole e molecole si hanno legami più deboli come quelli dipolo-dipolo, ione-dipolo o idrogeno.

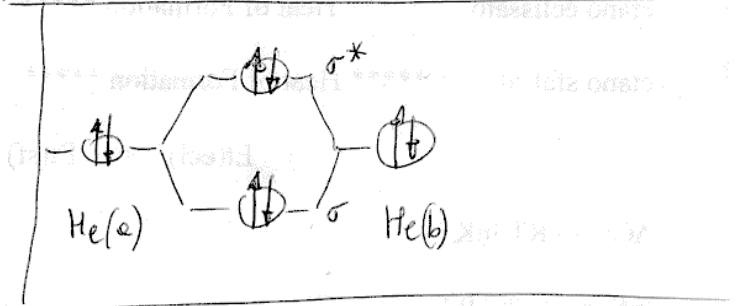
3) Teoria MO (definizione, approssimazione, applicazioni a  $\text{H}_2$ ,  $\text{He}_2$ ,  $\text{O}_2$ )

La Teoria MO tratta il legame nelle molecole calcolando gli orbitali molecolari che si formano nel campo elettrostatico formato da tutti i nuclei e tutti gli elettroni presenti, utilizzando l'equazione di Schrödinger. Queste però non si fecero mai risolubili per cui si devono utilizzare delle approssimazioni come quella chiamata LCAO (combinazione lineare di orbitali atomici). Nella Teoria MO se 2 orbitali atomici si ottengono 2 orbitali molecolari, uno di legame e uno di anti-legame, con mescolando  $n+n$  orbitali atomici si ottengono 2n orbitali molecolari, n di legame e n di anti-legame.

Nel caso delle molecole  $H_2$  si ha:  
 I due elettroni vanno nell'orbitale  $\sigma$  di legame e la molecola risulta piú stabile e quindi è legata.

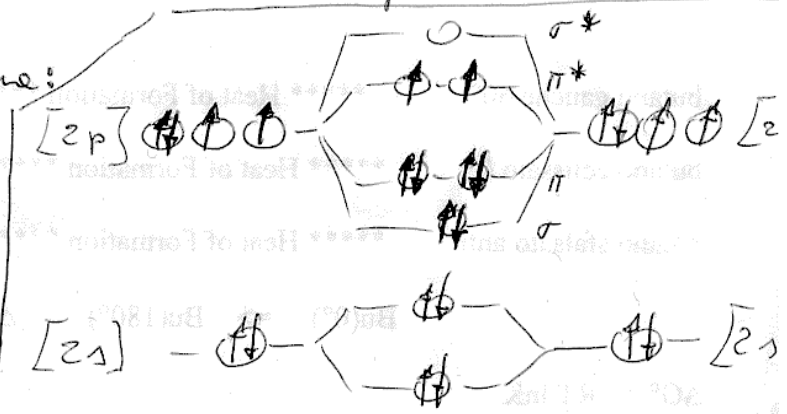


Nel caso delle molecole  $He_2$  si ha:  
 I 4 elettroni vanno 2 nell'orbitale di legame e 2 in quello di anti-legame. La molecola risulta meno stabile degli atomi separati e quindi non si forma. Infatti, l'energia maggiore dell'orbitale di anti-legame  $\sigma^*$  supera il guadagno di energia dell'orbitale di anti-legame  $\sigma$ .



Nel caso delle molecole  $O_2$  si ha:

Si osserva che due elettroni vanno ad occupare gli orbitali  $\pi^*$  e si dispongono con spin parallelo con lo spin complementare  $\uparrow + \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = +1$ . La molecola



infatti risulta diamagnetica. L'ordine di legame è  $4 - 2 = 2$  4 legami - 2 anti legami. La teoria MO prevede quindi per  $O_2$  un doppio legame.