

IL LEGAME COVALENTE

E' un legame dovuto alla condivisione di elettroni tra atomi; è interpretabile con le teorie L.V. (LEGAME DI VALENZA) e O.M.(ORBITALI MOLECOLARI)

TEORIA DEL LEGAME DI VALENZA DI LEWIS (L.V.)

Il legame covalente è dovuto alla formazione di una o più coppie localizzate di elettroni a spin antiparallelo, a partire da elettroni spaiati appartenenti ai due atomi diversi; a seconda del numero delle coppie condivise si parla di legame SINGOLO, DOPPIO o TRIPLO.

REGOLA DI KOSSEL (DELL'OTTETTO): gli atomi tendono ad assumere 8 elettroni nello stato esterno.

FORMULA DI STRUTTURA DI LEWIS: gli elettroni esterni degli atomi si rappresentano intorno al simbolo chimico dell'elemento: · elettrone spaiato; - copia solitaria; - legame singolo; = legame doppio; ≡ legame triplo.

RADICALE: è un composto che presenta elettroni spaiati.

MOLECOLA: è un'entità fondamentale di un composto chimico formata da atomi combinati in un determinato rapporto.

STRUTTURA INFINITA: è una disposizione che non riesce a saturare i legami entro un numero finito di atomi, ma costituisce un reticolo di atomi di estensione indefinita (es. diamante, quarzo)

POLARITA' DEL LEGAME: misura la capacità di condivisione degli elettroni.

ELETTRONEGATIVITA': è un parametro che dà la tendenza di un atomo ad attirare a sé la coppia elettronica in un legame covalente; nella scala Pauling viene assegnato 1.0 al Litio che perde un elettrone e 4.0 al Fluoro che ne assume uno, gli altri valori sono relativi.

		ELETTRONEGATIVITA' (Scala Pauling)																					
da 3.0 a 4.0		H																	He				
da 2.5 a 2.9		Li	Be															B	C	N	O	F	Ne
da 2.0 a 2.4		Na	Mg															Al	Si	P	S	Cl	Ar
da 1.5 a 1.9		K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr				
da 1.0 a 1.4		Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe				
< 1.0		Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn				

LEGAME OMOPOLARE: è un legame tra due atomi hanno elettronegatività pressochè uguale.

LEGAME ETEROPOLARE (POLARE, POLARIZZATO): è un legame tra due atomi hanno una differenza di elettronegatività (ci sono addensamenti di carica localizzati).

ENERGIA DI UN LEGAME COVALENTE: il legame tra due atomi di determinati elementi ha più o meno la stessa energia in tutti i composti; questa energia è proporzionale alla differenza di elettronegatività inversamente proporzionale alle dimensioni degli atomi ed è maggiore nei legami multipli.

CONFIGURAZIONI ELETTRONICHE:

elementi dello stesso gruppo hanno le stesse configurazioni elettroniche esterne, perciò formano anche composti analoghi.

1° periodo	H								He
2° periodo	Li	Be	B	C	N	O	F	Ne	
livello fondamentale	1	0	1	2	3	2	1	0	
promozioni s --> p		2	3	4					

STRUTTURA DEI COMPOSTI:

- 1) gli atomi del 2° periodo tendono a formare legami multipli.
- 2) gli atomi dei periodi successivi formano legami multipli solo in configurazioni elettroniche eccitate.
- 3) strutture con più di due ponti tra due atomi sono inesistenti.
- 4) negli anioni la carica è attribuita agli atomi più elettronegativi.
- 5) nei cationi gli elettroni vanno tolti agli atomi più elettropositivi.

LEGAME DATIVO (o COVALENTE DI COORDINAZIONE): è la condivisione di una coppia solitaria di un atomo con un altro atomo che abbia un orbitale vuoto a bassa energia.

DONATORE: è un atomo che tende a cedere una coppia solitaria (anioni monoatomici e atomo legato ad atomi più elettropositivi); può formare al massimo un legame dativo.

ACCETTORE: è un atomo che ha almeno un orbitale vuoto a bassa energia (catione monoatomico, atomo del 2° e 13° gruppo in molecole neutre, atomo dal 3° periodo in poi in molecole neutre, atomo di O eccitato); può formare un legame dativo per ogni orbitale disponibile.

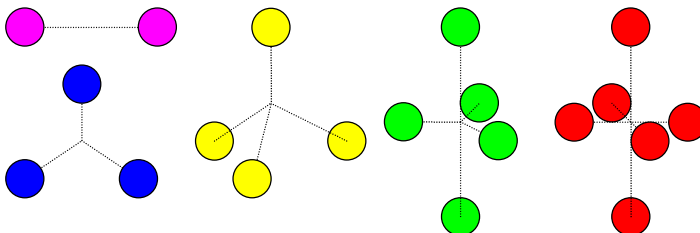
GEOMETRIA MOLECOLARE: è la disposizione relativa nello spazio dei nuclei degli atomi di una molecola o di un composto a struttura infinita.

ANGOLO DI LEGAME: è l'angolo formato dagli assi di due legami che hanno un atomo in comune; composti con un atomo centrale con lo stesso numero di coppie solitarie e con lo stesso numero di atomi periferici hanno una geometria quasi uguale; il legame dativo modifica solo gli angoli dell'atomo accettore, non quelli del donatore.

TEORIA V.S.E.P.R. (VALENCE STATE ELECTRON PAIR REPULSION)

Si considera come una SFERA ELETTRONICA ogni coppia solitaria, ogni coppia di legame singolo ed ogni gruppo di coppie in legami multipli, la geometria è definita dal numero delle sfere elettroniche.

n. sfere	angoli	forma
2	180°	lineare
3	120°	trigonale
4	109°3'	tetraedrica
5	90° e 120°	bipiramidale trigonale
6	90°	ottaedrica



coppie solitarie o coppie di legami multipli si respingono con più forza delle coppie di legami singoli, deformando gli angoli di legame; la polarità della molecola dipende dalle disposizioni asimmetriche.

TEORIA DEGLI ORBITALI MOLECOLARI (O.M.)

ORBITALI MOLECOLARI: funzioni d'onda delocalizzate che descrivono tutti gli elettroni di una sostanza covalente.

Dato che l'equazione di Schrödinger non è risolvibile, si considerano gli orbitali molecolari come combinazioni lineari di orbitali atomici con energie simili di atomi diversi (combinando n O.A. si ottengono n O.M.).

ORBITALE DI LEGAME: O.M. con energia inferiore a quella degli orbitali atomici di origine.

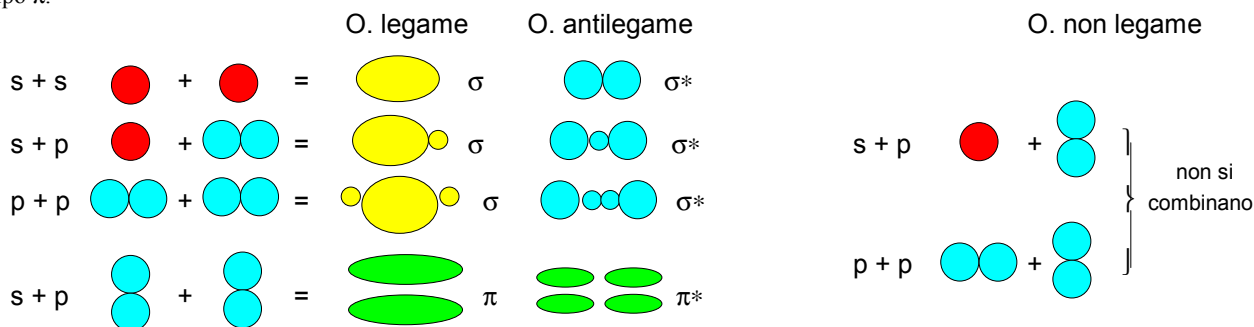
ORBITALE DI ANTILEGEME: O.M. con energia superiore a quella degli orbitali atomici di origine.

ORBITALE DI NON LEGAME: O.M. con energia pressoché uguale a quella degli orbitali atomici di origine.

ORBITALE σ : O.M. il cui asse coincide con l'asse di legame.

ORBITALE π : O.M. formato da serie di lobi posti simmetricamente sopra e sotto l'asse di legame; si forma tra orbitali p se gli atomi sono di piccole dimensioni (2° periodo), tra orbitali p e d anche a distanze più grandi.

Un legame singolo è dovuto ad un O.M. di tipo σ , mentre un legame multiplo è dovuto ad un O.M. di tipo σ ed a uno o più O.M. di tipo π .



STRUTTURA INFINITA: combinando un alto numero di O.A., si ottengono numerosi O.M. con differenze di energia minime tra un orbitale e il successivo (BANDA DI ENERGIA).

BANDA DI VALENZA: insieme degli orbitali di legame.

BANDA DI CONDUCIBILITA': insieme degli orbitali di antilegame.

CORREZIONE DELLA TEORIA L.V. ALLA LUCE DELLA TEORIA O.M.

ORBITALE IBRIDO: combinazione lineare degli orbitali atomici di un atomo

Ibridizzazione sp:	s + p	2 orbitali ibridi	180° (lineare)
Ibridizzazione sp ² :	s + p + p	3 orbitali ibridi	120° (trigonale)
Ibridizzazione sp ³ :	s + p + p + p	4 orbitali ibridi	109.3° (tetraedrica)
Ibridizzazione sp ³ d:	s + p + p + p + d	5 orbitali ibridi	90° e 120° (bipiramidale trigonale)
Ibridizzazione sp ³ d ² :	s + p + p + p + d + d	6 orbitali ibridi	90° (ottaedrica)

E' necessario ibridizzare tutti gli orbitali con elettroni spaiati, un orbitale per ogni legame multiplo, tutti gli orbitali con coppie solitarie e tutti gli orbitali che accettano legame dativo.

RISONANZA: oscillazione tra situazioni estreme nella distribuzione spaziale degli elettroni, dovuta alla necessità di localizzare elettroni che nella teoria O.M. risultano delocalizzati.

Per evitare di introdurre tale concetto, si trattano i legami σ con la teoria L.V. e i legami π con la teoria O.M.