

# **L'ORARIO DELLE LEZIONI DEL CORSO DI BIOCHIMICA SARA' VISIONABILE SETTIMANALMENTE SUL SITO WEB DEL CORSO DI LAUREA SAMS**

**ORARIO RICEVIMENTO STUDENTI**  
**Ogni Lunedì ore 16.00 – 18.00**  
**(salvo imprevisti impegni)**

**SEDE: Presso una delle aule poste a piano terra  
del Nuovo Complesso delle Scienze Biomediche**  
**(ingresso situato di fronte al CUP del Policlinico)**

**Per appuntamenti per il ricevimento o per qualsiasi esigenza (ma senza esagerare)**

**e-mail: [giuseppe.capitanio@uniba.it](mailto:giuseppe.capitanio@uniba.it)**

# CORSO DI LAUREA IN S.A.M.S

## Testi consigliati

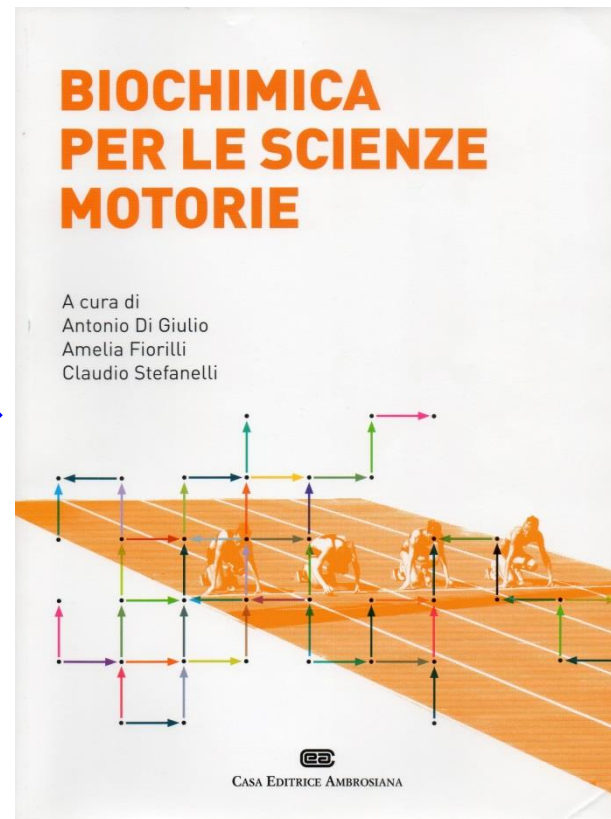
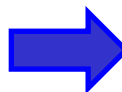
**Testo base per:  
Chimica, Chimica Organica e Biochimica**



**ROBERTI – ANTOGNELLI -  
ALUNNI BISTOCCHI - TALESA**  
Costo : € 45,00

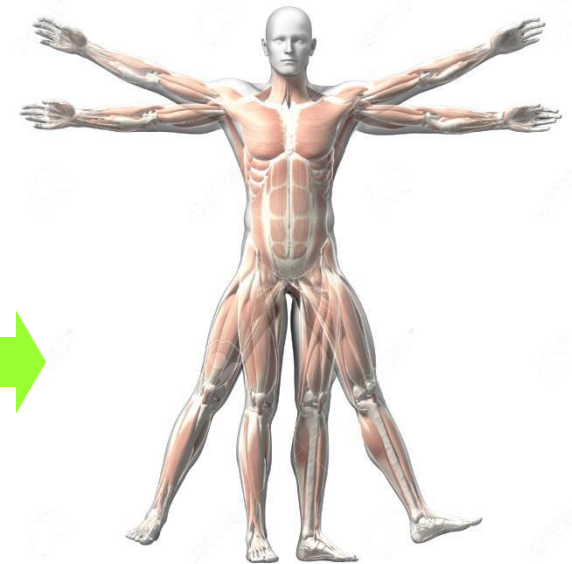
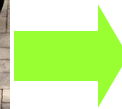
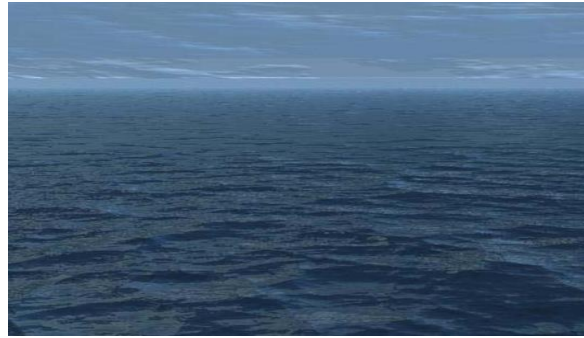
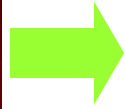
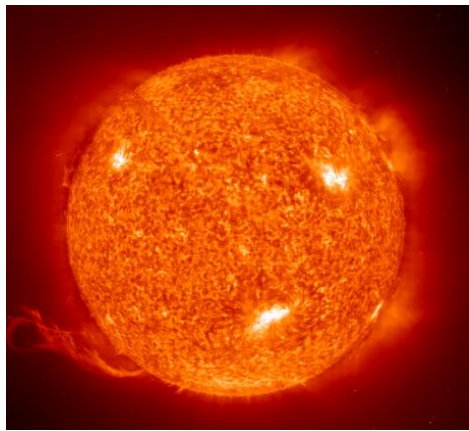
**Casa editrice: McGRAW-HILL**

*e per chi  
vuole  
approfondire*



**DI GIULIO - FIORILLI -  
STEFANELLI**  
Costo : € 40,00

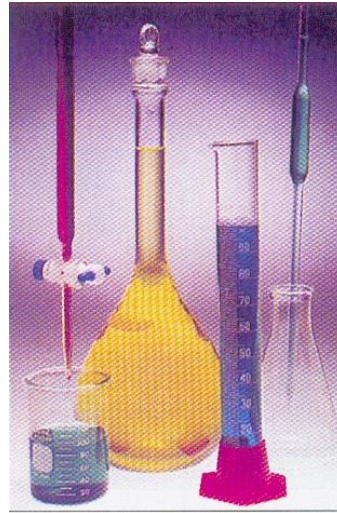
**Casa editrice: AMBROSIANA**



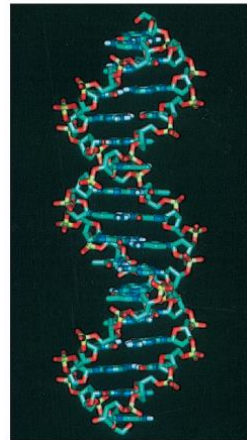
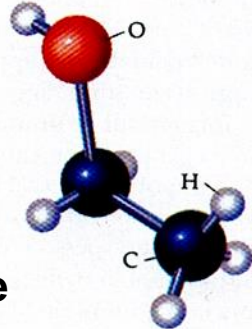
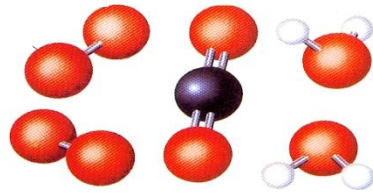
# Iter razionale del corso



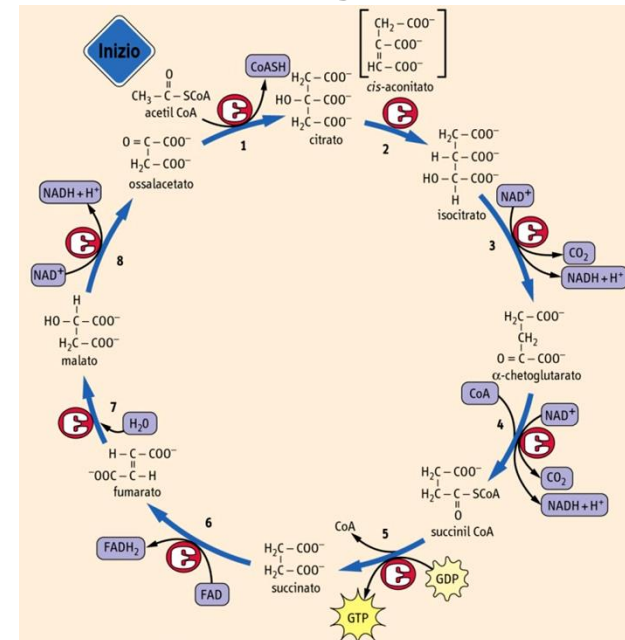
**Chimica Generale:**  
concetti fondamentali riguardanti  
la struttura dell'atomo, i legami,  
le soluzioni, gli equilibri, le reazioni,  
la termodinamica e la cinetica chimica.



**Chimica Organica e  
Propedeutica Biochimica:**  
chimica del carbonio,  
principali gruppi  
funzionali e loro reattività;  
studio delle principali  
molecole di interesse  
biologico e loro ruolo nelle  
cellule viventi.



**Biochimica:**  
studio delle principali  
vie metaboliche e loro  
regolazione, in condizioni  
normali e in risposta a  
a determinate condizioni  
fisiopatologiche.



# ELEMENTI, COMPOSTI, MISCELE

Metodo fisico:  
Filtrazione



(qualsiasi cosa che occupa spazio e possiede una massa)

**materia**

**sostanze pure**

**miscele**

separate con metodi fisici

**composti**

**elementi**

**omogenee**

**eterogenee**

separati con  
metodi chimici

(es. rame, oro, ferro)

(es. acqua,  
cloruro di  
sodio, ammoniaca)

Una **MISCELA** è un campione di materia costituito da due o più sostanze.

I **COMPOSTI** sono sostanze più complesse formate da atomi differenti che per mezzo di reazioni chimiche si decompongono in elementi.

Gli **ELEMENTI** sono sostanze formate da atomi dello stesso tipo.

L' **ATOMO** è la più piccola parte dell'elemento che conserva tutte le caratteristiche strutturali per l'identificazione dell'elemento a cui appartiene.

# Def. di FASE

Per fase si deve intendere una porzione di materia che presenta una composizione omogenea e costante senza alcuna superficie di separazione.

Una miscela in cui è presente una sola fase è detta **omogenea**. Tipico esempio sono le soluzioni (sale sciolto in acqua). Una miscela in cui è possibile evidenziare più di una fase è detta **eterogenea** o **miscuglio**.

Esempi di miscele:

L'**omogeneità** dipende dalle dimensioni del componente disperso, che a loro volta dipendono dal metodo sperimentale usato per determinarle.

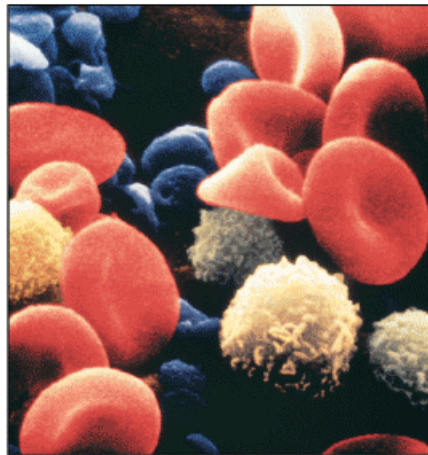
Se il diametro della particella dispersa è  $< 1 \text{ nm}$  → Soluzioni

**miscela  
eterogenea  
liquido-liquido**

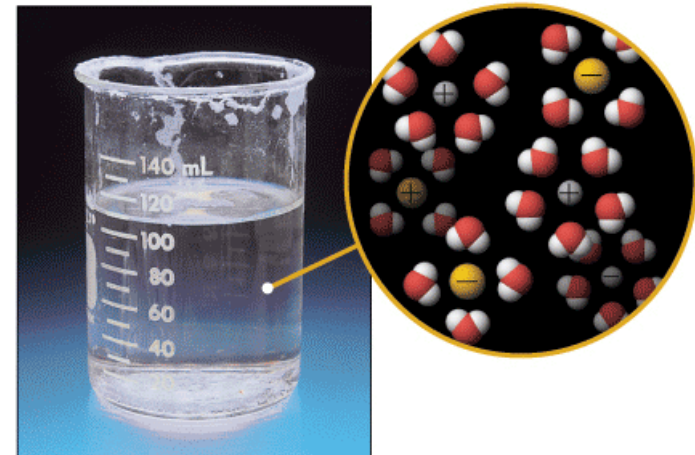
**Miscela  
eterogenea  
solido-liquido**



**Campione di sangue:  
miscela eterogenea**



**Sale in acqua:  
miscela omogenea**



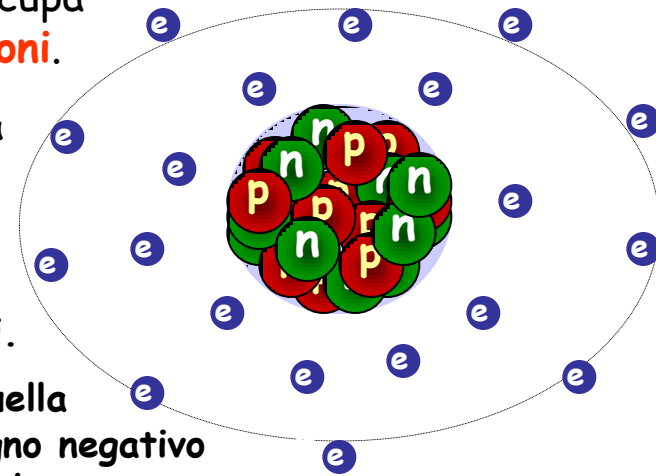
## VISIONE SEMPLIFICATA DELL'ATOMO

Un atomo può essere assimilato ad una minuscola sfera che occupa la parte centrale (**il nucleo**), circondata da una **nube di elettroni**.

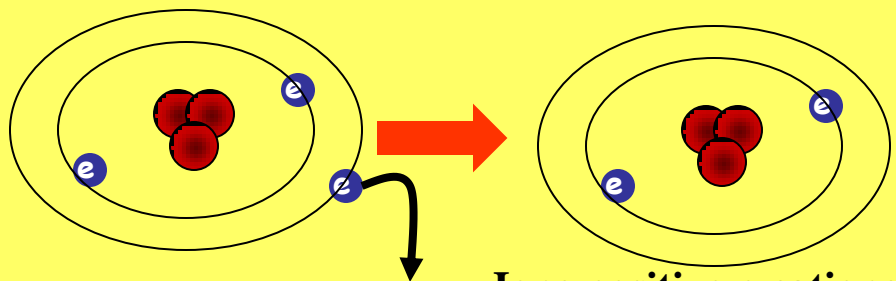
**nucleo** → **P** **Protone:** ha carica elettrica positiva (+) e presenta una massa pari a  $1.672 \times 10^{-24}$  grammi.

**n** **Neutrone:** non ha carica elettrica ma presenta una massa pari a  $1.674 \times 10^{-24}$  grammi.

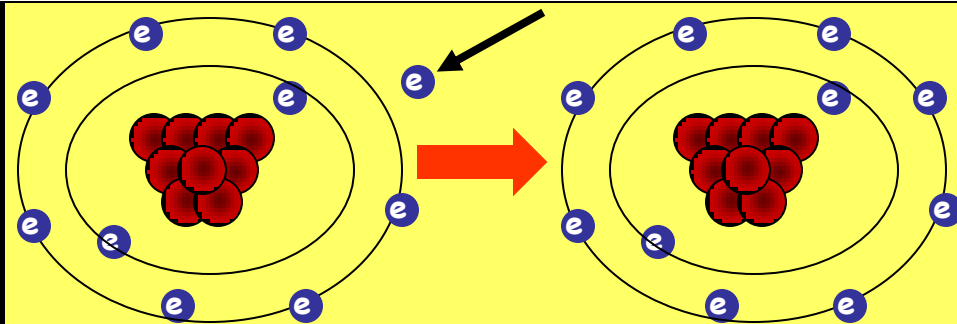
**e** → **Elettrone:** ha carica elettrica con valore uguale a quella del protone ( $1.602 \times 10^{-19}$  C) ma con segno negativo (-) e possiede una massa di circa 1840 volte inferiore rispetto a quella del protone.



Un atomo è neutro, quindi deve avere un uguale numero di protoni ed elettroni :



Ione positivo o catione



Ione negativo o anione

**Numero atomico (Z):** n.º dei protoni

**Numero di massa (A):** n.º dei protoni + n.º dei neutroni

Le proprietà chimiche di un atomo e quindi il suo comportamento, dipendono dalla configurazione dello strato più esterno di elettroni appartenenti ad esso.

# PESO ATOMICO, PESO MOLECOLARE, MOLE

Nucleoni (protoni e neutroni)  $\longrightarrow$  Ordine di grandezza :  $10^{-24}$  g

Si preferisce quindi utilizzare la seguente grandezza di riferimento:  
 **$1/12$  della massa dell'isotopo  $^{12}\text{C} = 1.6605 \times 10^{-24}$  g**

**Tale massa è chiamata unità di massa atomica (u.m.a.)  
o equivalentemente Dalton (Da).**

**Qualsiasi massa atomica quindi, è rapportata alla massa presa come riferimento (u.m.a.); pertanto la massa atomica è una grandezza relativa, e di conseguenza il valore numerico è puro, adimensionale.**

Massa atomica in g ● Massa atomica di riferimento ● Massa atomica relativa

H $\Rightarrow$	$1.673 \times 10^{-24}$ g	/	$1.66 \times 10^{-24}$ g	1.008	u.m.a.
O $\Rightarrow$	$2.656 \times 10^{-23}$ g	/	$1.66 \times 10^{-24}$ g	15.99	u.m.a.
U $\Rightarrow$	$3.951 \times 10^{-22}$ g	/	$1.66 \times 10^{-24}$ g	238.03	u.m.a.



Per **MOLECOLA** si deve intendere la più piccola unità discreta, costituita da 2 o più atomi uguali o diversi, che mantiene le stesse caratteristiche chimiche del composto , ad es.  $\text{H}_2\text{O}$  ,  $\text{NH}_3$  ,  $\text{C}_6\text{H}_{12}\text{O}_6$

**Peso Molecolare:** somma dei pesi atomici di tutti gli atomi che costituiscono la molecola "discreta".

Per composti costituiti da un insieme continuo di atomi si parla di **formula empirica**, che indica solo il tipo di atomi e in quale rapporto sono presenti, essendo per tali composti impossibile identificare una singola molecola, caso ad esempio dei composti ionici, ad es.  $\text{NaCl}$  , o delle strutture cristalline dei metalli.

**Peso Formula:** somma dei pesi atomici di tutti gli atomi che costituiscono la formula empirica.

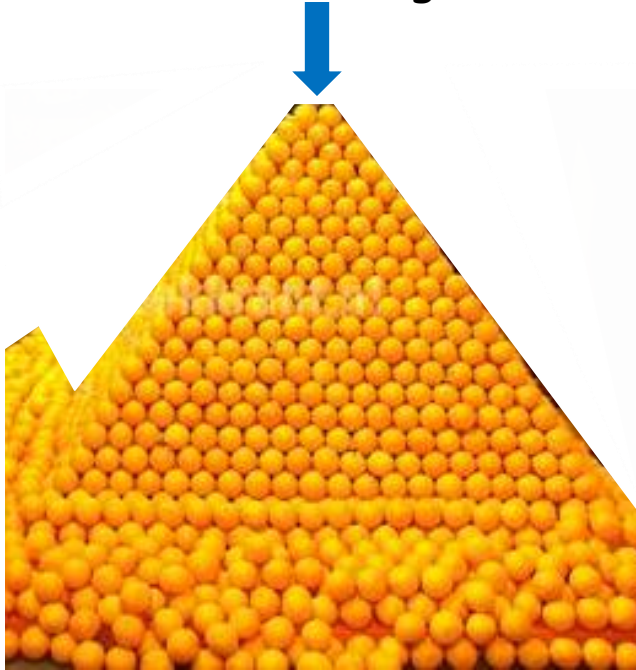
**N (NUMERO DI AVOGADRO)** : numero di atomi presenti in  
12 g di  $^{12}\text{C}$  =  $6.022 \times 10^{23}$

od anche  $N = 1 \text{ g} / 1.6605 \times 10^{-24} \text{ g (u.m.a.)}$

## DEFINIZIONE DI MOLE

Si definisce **MOLE** la quantità di materia che contiene un numero di Avogadro di particelle ( $6.022 \times 10^{23}$  atomi, molecole, o altre unità fondamentali)

contiene il  
numero di Avogadro



1 mole di arance  
(peso:  $6,022 \times 10^{19}$  tonnellate)

## Moli di alcuni elementi

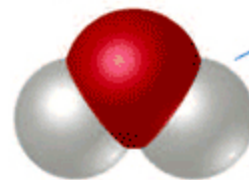


La quantità in grammi presente in una mole (g/mole) di un elemento o composto è chiamata **MASSA** o **PESO MOLARE**

Si definisce **MASSA o PESO MOLARE** di un elemento o composto la quantità in grammi presente in una mole (g/mole).

**La massa molare (MM) è numericamente equivalente alla massa atomica o molecolare espressa in u.m.a.**

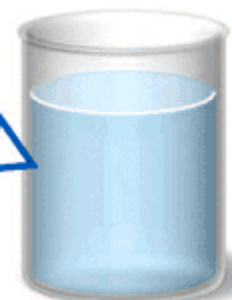
Singola molecola



1 molecola di H<sub>2</sub>O  
(18,0 amu)

Un numero di Avogadro di molecole  
( $6,02 \times 10^{23}$ )

Campione da laboratorio



1 mol H<sub>2</sub>O  
(18,0 g)

**RELAZIONE MASSA MOLARE**



**MASSA ATOMICA O MOLECOLARE**

X (Massa in g di una mole)

$$\frac{X}{N \text{ (numero di Avogadro)}} = Y \text{ (massa in grammi di un atomo)}$$

Y

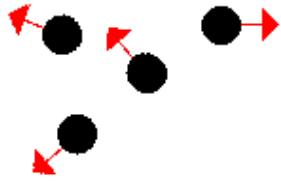
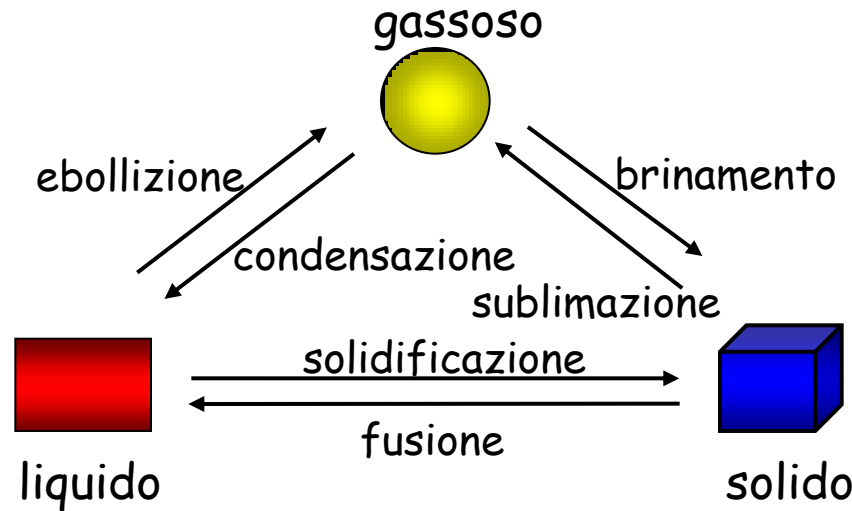
$$\frac{Y}{\text{u.m.a. (} 1.66 \times 10^{-24} \text{ g)}} = X \text{ (massa atomica in Dalton)}$$

Es.: **SACCAROSIO**

$$\frac{342,3 \text{ (Massa in g di una mole)}}{6,022 \times 10^{23} \text{ (numero di Avogadro)}} = 5,68 \times 10^{-22} \text{ (massa in grammi di una molecola di saccarosio)}$$

$$\frac{5,68 \times 10^{-22}}{\text{u.m.a. (} 1.66 \times 10^{-24} \text{ g)}} = 342,2 \text{ (massa molecolare in Dalton)}$$

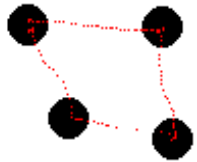
# Stati di aggregazione della materia e passaggi di stato



assenza di legami

**Stato gassoso:** la materia è presente sotto forma di particelle in continuo movimento che occupano in modo omogeneo tutto il volume del recipiente di cui assumono la forma.

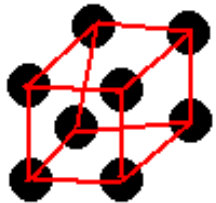
diminuzione di  $T$  ↓ ↓ aumento di  $P$



legami deboli

**Stato liquido:** la materia è presente sotto forma di particelle tra le quali si esercitano forze di coesione che prevalgono su quelle di movimento che tendono ad allontanarle; pertanto i liquidi assumono la forma del recipiente ma hanno volume proprio.

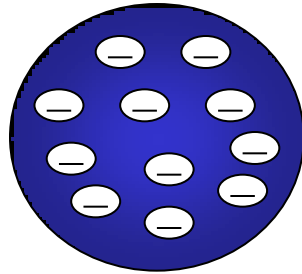
diminuzione di  $T$  ↓ ↓ aumento di  $P$



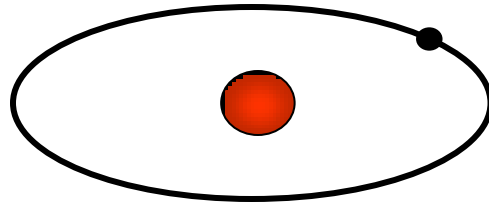
legami forti

**Stato solido:** la materia è formata da particelle legate da forze attrattive o di coesione per cui le sostanze solide assumono una disposizione obbligata nello spazio avendo forma e volume propri.

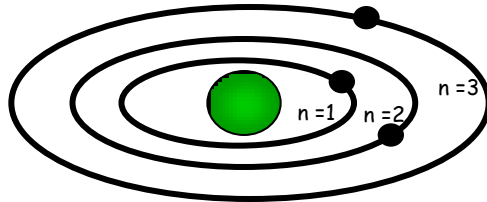
# Vecchi modelli atomici



modello di Thomson



modello di Rutherford



modello di Bohr

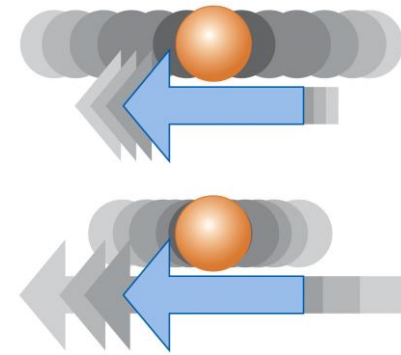
**Vecchi perché:**

**Non è possibile descrivere in termini fisici il moto dell'elettrone intorno al nucleo, cioè non esiste una traiettoria (orbita) precisa dell'elettrone !!!**

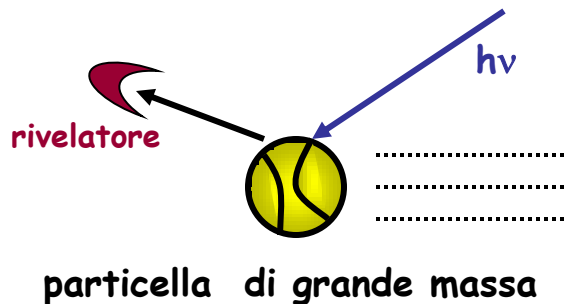
# Principio di indeterminazione di Heisenberg

L'incertezza della posizione ( $\Delta x$ ) e quella della quantità di moto ( $\Delta mv$ ) di una particella deve soddisfare la seguente relazione :

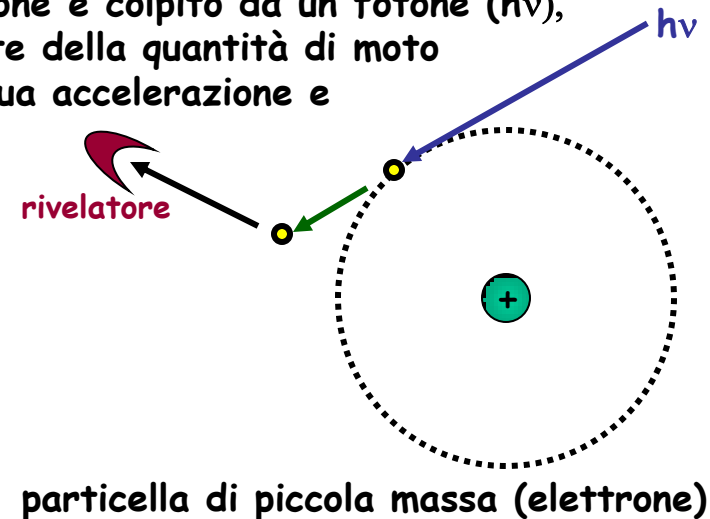
$$\Delta x \times \Delta mv \geq h/4\pi$$



Tale principio afferma in pratica che, per una particella di massa subatomica, ad esempio l'elettrone, non è possibile conoscere contemporaneamente e con pari esattezza, la posizione e la velocità di tale particella.



Quando l'elettrone è colpito da un fotone ( $h\nu$ ), ne assorbe parte della quantità di moto provocando la sua accelerazione e il cambio della sua posizione.



**Conclusioni:** Non è possibile descrivere da quanto detto il moto di particelle piccole come l'elettrone tramite una precisa realtà fisica come un'orbita o una traiettoria.

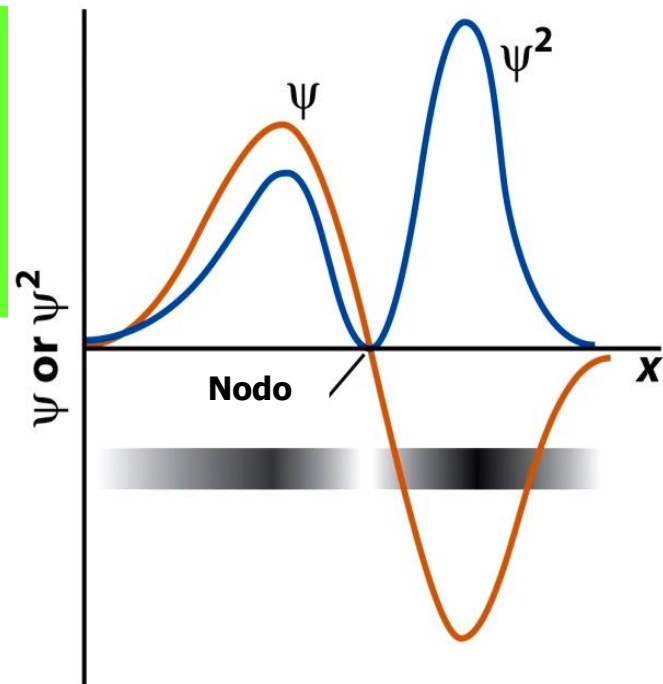
Il moto dell'elettrone intorno al nucleo deve piuttosto essere descritto per mezzo di una funzione matematica detta **FUNZIONE D'ONDA**.

Le soluzioni possibili della funzione d'onda sono ottenute attribuendo dei valori interi a determinati parametri presenti nell'equazione della funzione d'onda

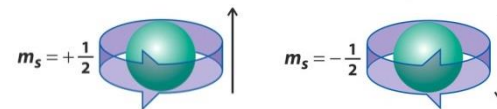
→ I parametri sono **3** e sono detti **numeri quantici** ←

La funzione d'onda descritta da ben definiti numeri quantici è chiamata **ORBITALE**, che rappresenta la regione dello spazio dove si ha la massima probabilità di trovare un elettrone con una certa energia

- $n$  (numero quantico principale)
- $l$  (numero quantico secondario)
- $m$  (numero quantico magnetico)



Esiste un quarto numero quantico ( **numero quantico di spin,  $m_s$**  ) legato alla rotazione dell'elettrone intorno al suo asse. L'elettrone si comporta quindi come un micromagnete allineandosi o meno ad un eventuale campo magnetico esterno.

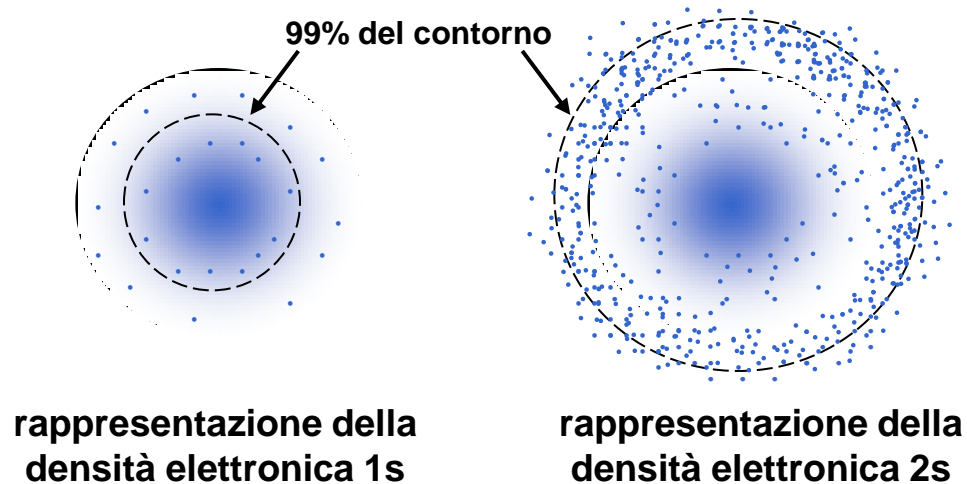


Il quadrato della funzione d'onda  $\Psi$ , cioè  $\Psi^2 \Delta v$ , indica la densità di probabilità elettronica in un punto di coordinate  $x, y, z$ , ossia **la probabilità che l'elettrone si trovi nel volume infinitesimo  $\Delta v$  intorno ad un punto di coordinate  $x, y, z$**

# Moto dell'elettrone intorno al nucleo

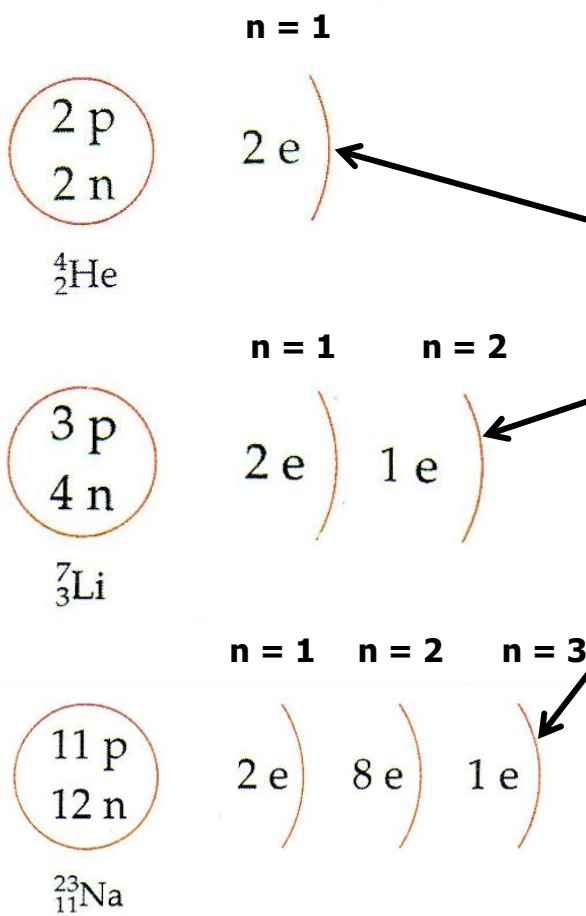
il moto dell'elettrone intorno al nucleo è descritto in termini probabilistici dal quadrato di una funzione d'onda (orbitale)

**Non si ha mai la certezza assoluta di trovare in un certo punto e ad un dato istante l'elettrone che si muove intorno al nucleo !**

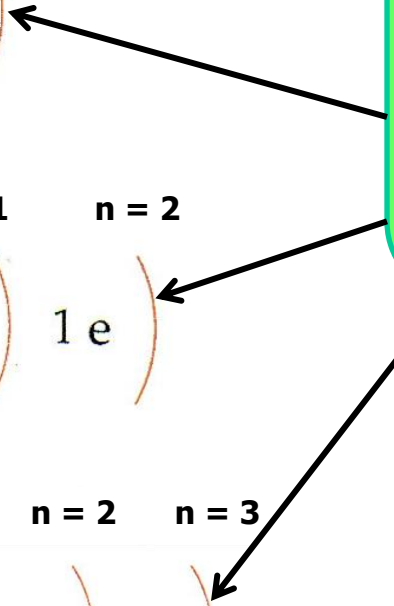




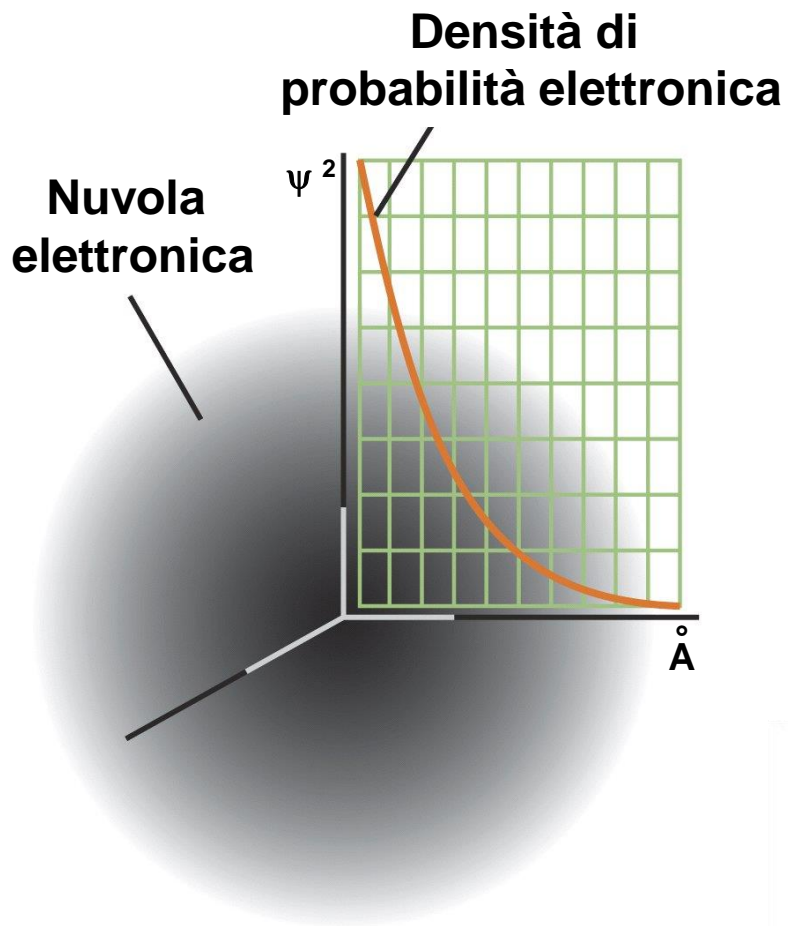
# Distribuzione a strati e sottostrati (livelli e sottolivelli) degli elettroni intorno al nucleo



Gli elettroni presenti nel livello  $n$  più lontano dal nucleo (strato di valenza) sono denominati **elettroni di valenza** e sono quelli coinvolti nella formazione dei legami chimici.

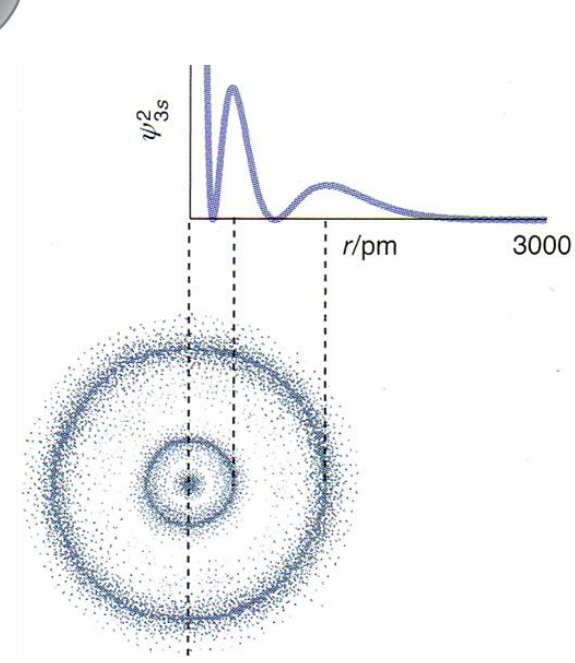
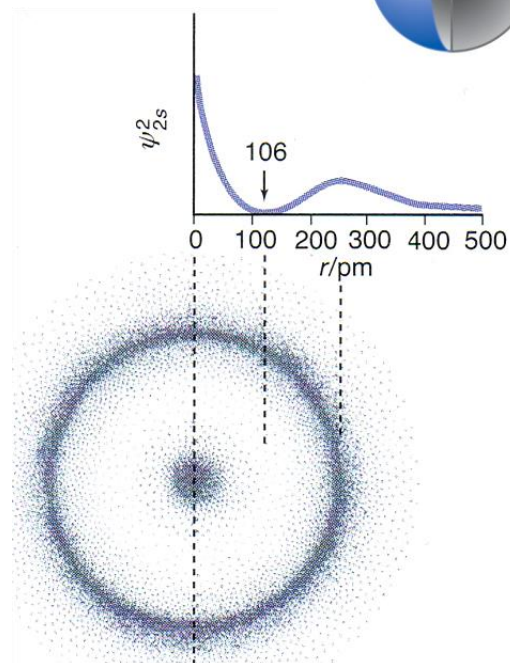
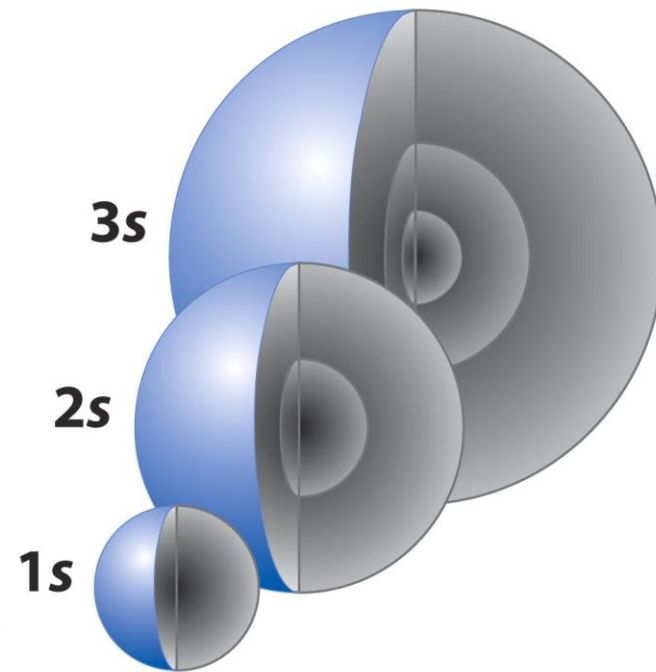


## Rappresentazioni della densità di probabilità elettronica 1s – 2s – 3s



### Orbitale 1S

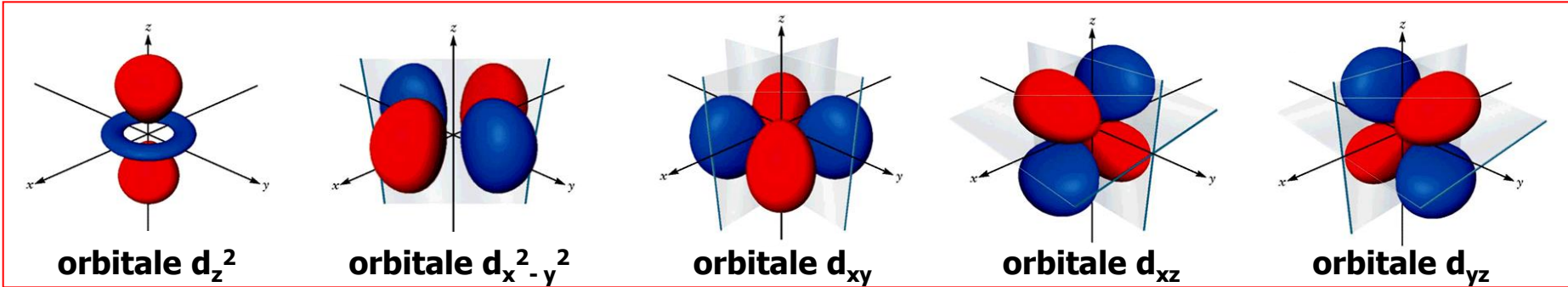
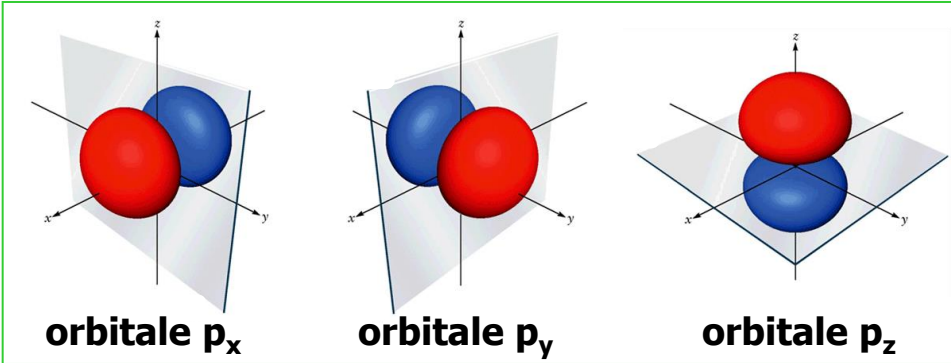
Un atomo non ha un confine ben definito al contrario del modello atomico di Bohr !



# NUMERI QUANTICI E ORBITALI

- **numero quantico principale ( n )**: indica il livello energetico dell'orbitale (che va da valori negativi a valori sempre meno negativi via via che ci si allontana dal nucleo) e la sua distanza media dal nucleo; ( n può variare da 1 fino ad  $\infty$  )
- **numero quantico secondario o azimutale ( l )**: indica la forma dell'orbitale; ( l può variare da 0 ad n-1 )
- **numero quantico magnetico ( m )**: indica l'orientazione dell'orbitale nello spazio; ( m può variare da -l a +l incluso lo zero )

n	l (simbolo)	m	numero di orbitali per livello (n <sup>2</sup> )
1	0 s	0	1
2	0 s	0	4
	1 p	-1, 0, +1	
3	0 s	0	9
	1 p	-1, 0, +1	
	2 d	-2, -1, 0, +1, +2	
4	0 s	0	16
	1 p	-1, 0, +1	
	2 d	-2, -1, 0, +1, +2	
	3 f	-3, -2, -1, 0, +1, +2, +3	

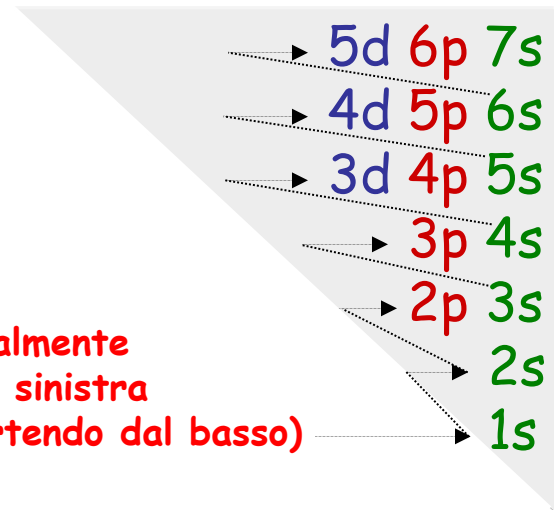


# CONFIGURAZIONE ELETTRONICA DEGLI ELEMENTI

## Principio di Aufbau

Gli elettroni di ciascun atomo si configurano negli orbitali secondo un ordine di energia crescente secondo la somma  $n + l$ . Se due sottostrati hanno lo stesso valore si riempie per primo quello che ha il valore più basso di  $n$ .

Ordine energetico di riempimento degli orbitali



(si sale orizzontalmente  
incominciando da sinistra  
verso destra partendo dal basso)

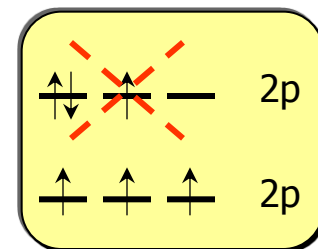


## Principio di esclusione di Pauli

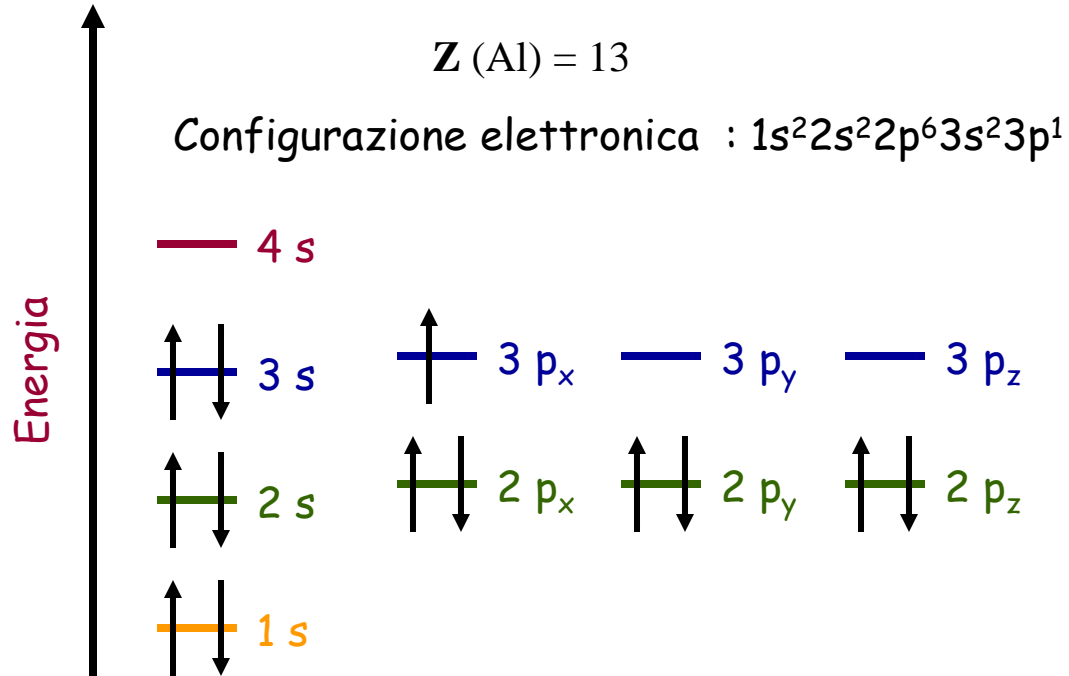
In un atomo non possono esistere due elettroni aventi gli stessi quattro numeri quantici, ma devono differire almeno per il numero quantico di spin.

## Regola di Hund o della massima molteplicità

La più stabile disposizione degli elettroni negli orbitali degeneri (isoenergetici) è quella corrispondente al maggior numero di spin paralleli.



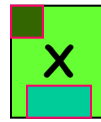
# RIEMPIMENTO ELETTRONICO DEGLI ORBITALI



# TABELLA PERIODICA DEGLI ELEMENTI

Sono chiamati **metallici** gli elementi caratterizzati da bassa affinità per l'elettrone e basso valore della energia di ionizzazione. Sono elementi metallici quelli del primo e del secondo gruppo della tavola periodica.

numero atomico



massa atomica

Si definiscono **non metallici** gli elementi del V-VII gruppo

Gas nobili

VIIIA

1	IA 1 H 1.0079											2 He 4.0026	VIIIA					
2	3 Li 6.941	4 IIA Be 9.0122											5 B 10.811	6 C 12.011	7 N 14.007	8 O 15.999	9 F 18.998	10 Ne 20.18
3	11 Na 22.99	12 Mg 24.305											13 Al 26.982	14 Si 28.086	15 P 30.974	16 S 32.065	17 Cl 35.453	18 Ar 39.948
4	19 K 39.098	20 Ca 40.078	21 IIIB Sc 44.955	22 IVB Ti 47.88	23 VB V 50.941	24 VIB Cr 51.996	25 VIIB Mn 54.938	26 VIIIB Fe 55.847	27 VIIIB Co 58.933	28 VIIIB Ni 58.693	29 IB Cu 63.546	30 IIB Zn 65.39	31 Ga 69.723	32 Ge 72.61	33 As 74.922	34 Se 78.96	35 Br 79.904	36 Kr 83.8
5	37 Rb 85.468	38 Sr 87.62	39 Y 88.906	40 Zr 91.224	41 Nb 92.906	42 Mo 95.94	43 Tc (97.91)	44 Ru 101.07	45 Rh 102.91	46 Pd 106.42	47 Ag 107.87	48 Cd 112.41	49 In 114.82	50 Sn 118.71	51 Sb 121.76	52 Te 127.6	53 I 126.9	54 Xe 131.29
6	55 Cs 132.91	56 Ba 137.33	57 La 138.91	58 Hf 178.49	59 Ta 180.95	60 W 183.84	61 Re 186.21	62 Os 190.23	63 Ir 192.22	64 Pt 195.08	65 Au 196.97	66 Hg 200.59	67 Tl 204.38	68 Pb 207.2	69 Bi 208.98	70 Po (209)	71 At (210)	72 Rn (222)
7	87 Fr (223)	88 Ra (226)	89 Ac (227)	104 Rf (261.1)	105 Db (262.1)	106 Sg (263.1)	107 Bh (262.1)	108 Hs (265.1)	109 Mt (266.1)	110 Uun (269)	111 Uuu (272)	112 Uub (277)						

Metalli alcalini	Attinidi
Alcalini terrosi	Lantanidi
Metalli	Non metalli
Metalli di tr.	Alogeni
Gas nobili	

Gli elementi di transizione hanno carattere metallico

Gli elementi del III gruppo hanno caratteristiche intermedie e sono definiti elementi anfoteri.

serie dei lantanidi

58 Ce 140.12	59 Pr 140.91	60 Nd 144.24	61 Pm (144.9)	62 Sm 150.36	63 Eu 151.97	64 Gd 157.25	65 Tb 158.93	66 Dy 162.5	67 Ho 164.93	68 Er 167.26	69 Tm 168.93	70 Yb 173.04	71 Lu 174.97
--------------------	--------------------	--------------------	---------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	-------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------	--------------------

serie degli attinidi

90 Th 232.04	91 Pa 231.04	92 U 238.03	93 Np (237)	94 Pu (244.1)	95 Am (243.1)	96 Cm (247.1)	97 Bk (247.1)	98 Cf (251.1)	99 Es (252.1)	100 Fm (257.1)	101 Md (258.1)	102 No (259.1)	103 Lr (262.1)
--------------------	--------------------	-------------------	-------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	---------------------	----------------------	----------------------	----------------------	----------------------

# Proprietà della tavola periodica degli elementi

## ELETTRONEGATIVITA'

Si definisce *elettronegatività* la tendenza di un atomo in una molecola ad attrarre verso di sé gli elettroni di legame che lo legano ad un altro atomo di natura diversa.

Elemento più elettronegativo

H 2,1																
Li 1,0	Be 1,5											B 2,0	C 2,5	N 3,0	O 3,5	F 4,0
Na 1,0	Mg 1,2											Al 1,5	Si 1,8	P 2,1	S 2,5	Cl 3,0
K 0,9	Ca 1,0	Sc 1,3	Ti 1,4	V 1,5	Cr 1,6	Mn 1,6	Fe 1,7	Co 1,7	Ni 1,8	Cu 1,8	Zn 1,6	Ga 1,7	Ge 1,9	As 2,1	Se 2,4	Br 2,8
Rb 0,9	Sr 1,0	Y 1,2	Zr 1,3	Nb 1,5	Mo 1,6	Tc 1,7	Ru 1,8	Rh 1,8	Pd 1,8	Ag 1,6	Cd 1,6	In 1,6	Sn 1,8	Sb 1,9	Te 2,1	I 2,5
Cs 0,8	Ba 1,0	La 1,1	Hf 1,3	Ta 1,4	W 1,5	Re 1,7	Os 1,9	Ir 1,9	Pt 1,8	Au 1,9	Hg 1,7	Tl 1,6	Pb 1,7	Bi 1,8	Po 1,9	At 2,1
Fr 0,8	Ra 1,0	Ac 1,1														

Scala delle elettronegatività secondo Pauling

diminuzione

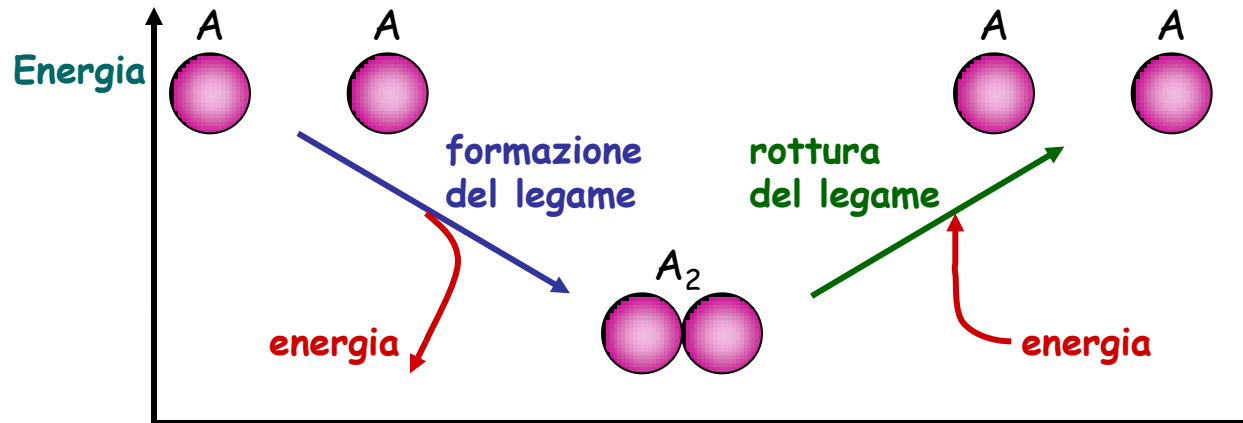
aumento

Cs — F

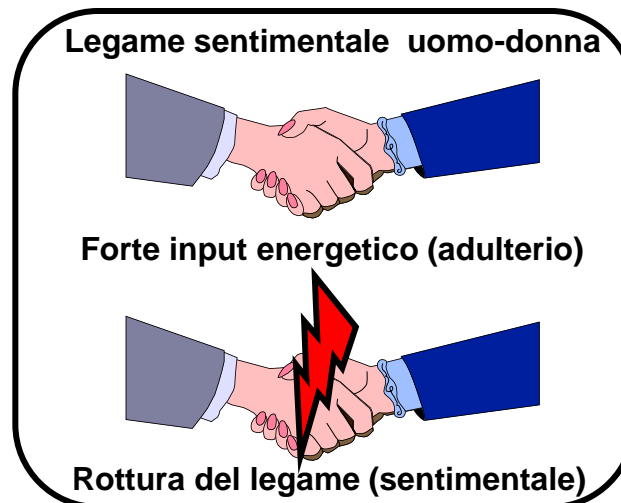
Elemento meno elettronegativo

# Legame chimico

Gli atomi tendono a legarsi spontaneamente fra di loro, per formare molecole, ogni qual volta questo processo permette loro di ottenere una **condizione di minore energia** e quindi una **condizione di maggiore stabilità degli atomi legati rispetto a quelli liberi**. Questo processo dà luogo al legame chimico.



**Formazione di un legame → processo esotermico (liberazione di energia)**  
**Rottura di un legame → processo endotermico (assorbimento di energia)**

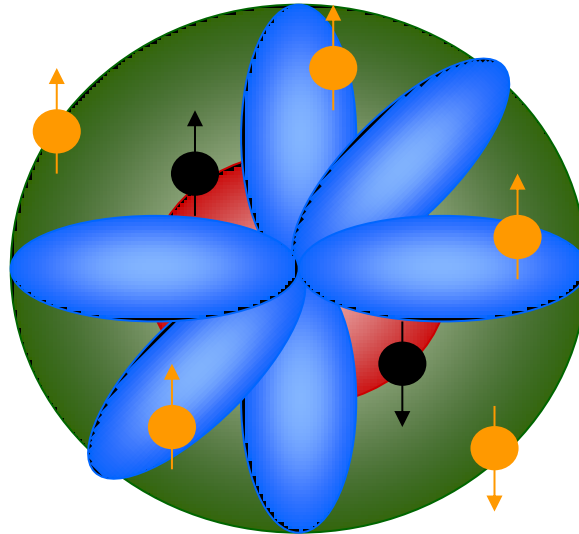




Si definisce **ENERGIA DI LEGAME** la minima energia che bisogna applicare, partendo dalla distanza di legame, per allontanare a distanza infinita tra di loro due atomi.

Ogni legame tra atomi coinvolge, in un modo o nell'altro, gli elettroni periferici, detti **ELETTRONI DI VALENZA**, dell'atomo stesso.

ESEMPIO: Orbitali  
dell'atomo  
di azoto (N)



●↑  
●↑  
●↑  
●↓  
●↓  
●↑

●↑ elettroni del guscio interno 1S

●↑ elettroni del guscio esterno (numero quantico principale più alto) o elettroni di valenza

# SIMBOLISMO DI LEWIS

E' un semplice sistema per sistemare gli elettroni di valenza intorno ad atomi, molecole o ioni introdotto da G.N. Lewis agli inizi del XX secolo.

La struttura di Lewis è utilizzata in particolare per gli elementi in cui gli elettroni del guscio più esterno si trovano negli orbitali *s* e *p*.



**Regole di base :**

- Disegnare il simbolo atomico
- Considerare ogni lato come una scatola contenente massimo 2 elettroni
- Contare gli elettroni presenti nel guscio di valenza

Gli elettroni spaiati sono rappresentati da punti.



Le coppie di elettroni appaiati in un orbitale da un trattino.

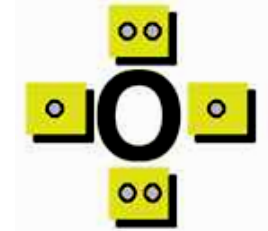


equivale a

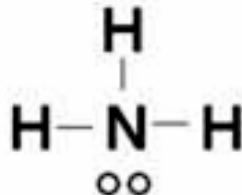


L'ossigeno ha 6 elettroni di valenza

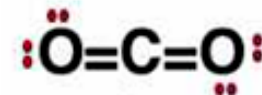
Incominciando a collocarli nelle scatole ...



otteniamo ... la struttura di Lewis per l'ossigeno

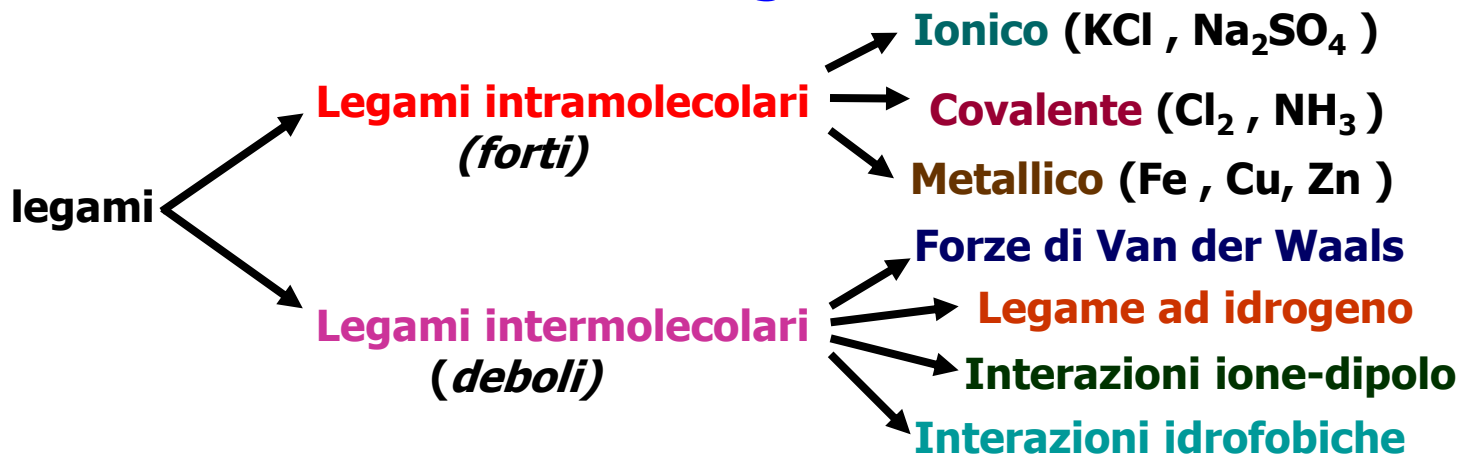


Ammoniaca ,  $NH_3$

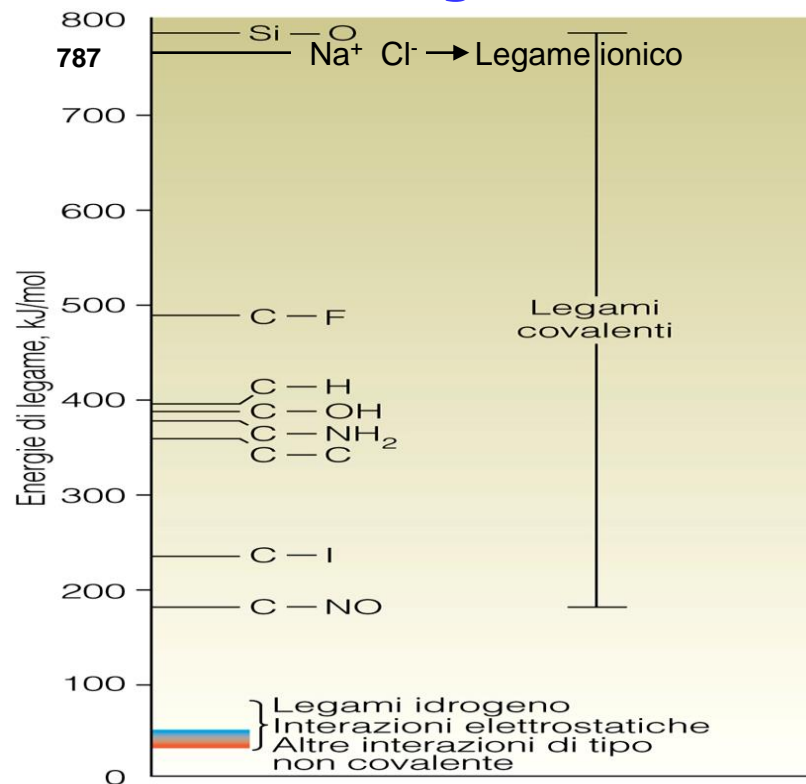


Anidride carbonica,  $CO_2$

# Classificazione dei legami chimici



## Forza dei legami chimici



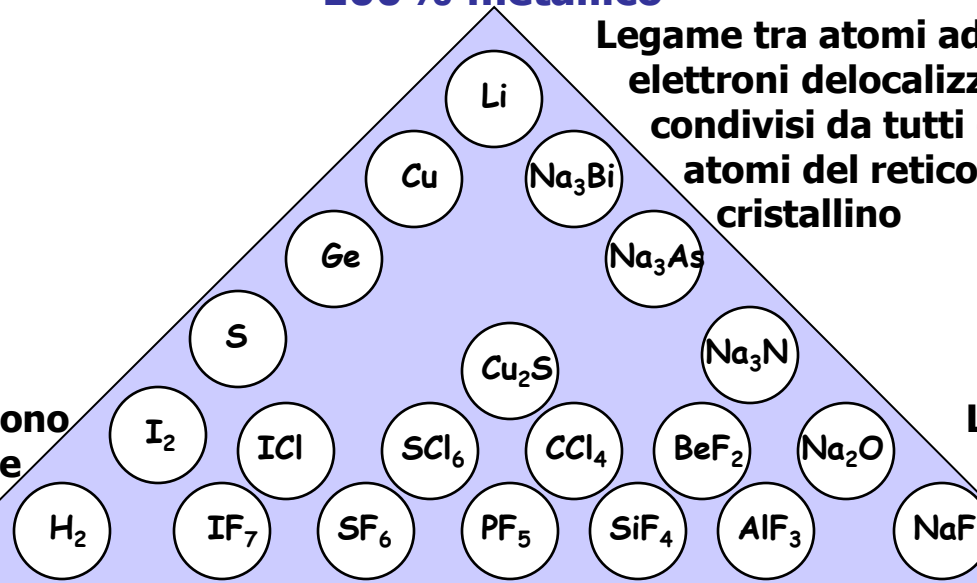
# Casi limite ideali dei tre principali tipi di legame chimico

100% metallico

Legame tra atomi ad elettroni delocalizzati condivisi da tutti gli atomi del reticolo cristallino

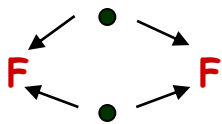
Legame tra atomi in cui sono condivise una o più coppie di elettroni di valenza

Legame tra ioni dotati di carica elettrostatica (+,-) opposta

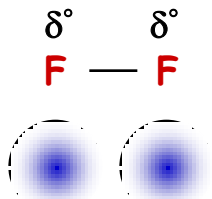


100% covalente

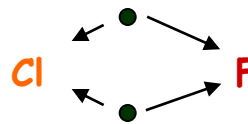
100% ionico



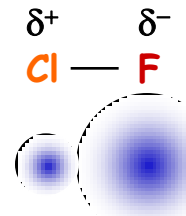
Gli elettroni sono egualmente attratti dai due atomi di fluoro



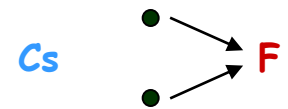
La densità della nuvola elettronica è la stessa attorno ai due atomi (legame covalente non polare)



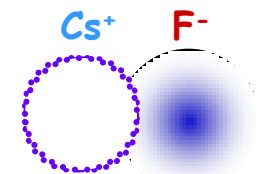
L'atomo di fluoro attrae più fortemente i due elettroni



La densità della nuvola elettronica è maggiore attorno all'atomo di fluoro (legame covalente polare)



L'atomo di cesio ha attrazione quasi nulla per gli elettroni rispetto all'atomo di fluoro

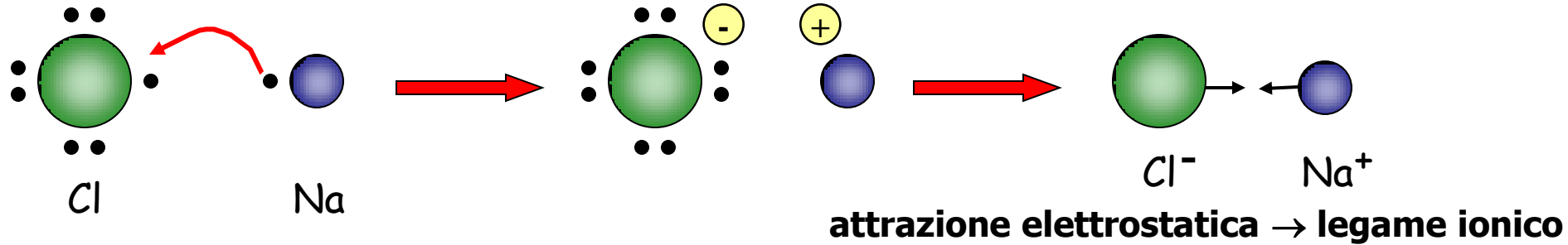


(legame ionico)

# Legame ionico

Quando atomi di un **metallo** in particolare quelli del **blocco s** (Energia di ionizzazione bassa) si trovano nelle vicinanze di atomi di un **non-metallo** (Affinità elettronica alta) può succedere che gli elettroni più esterni passino dagli atomi del metallo a quelli del non-metallo, generando quindi cationi del metallo e anioni del non-metallo). Le cariche opposte si attraggono per effetto della **forza di Coulomb** e gli ioni si sistemano ad una distanza tale da rendere minime le forze di repulsione e massime quelle di attrazione.

Zoom su una coppia di atomi Na/Cl del reticolo cristallino:

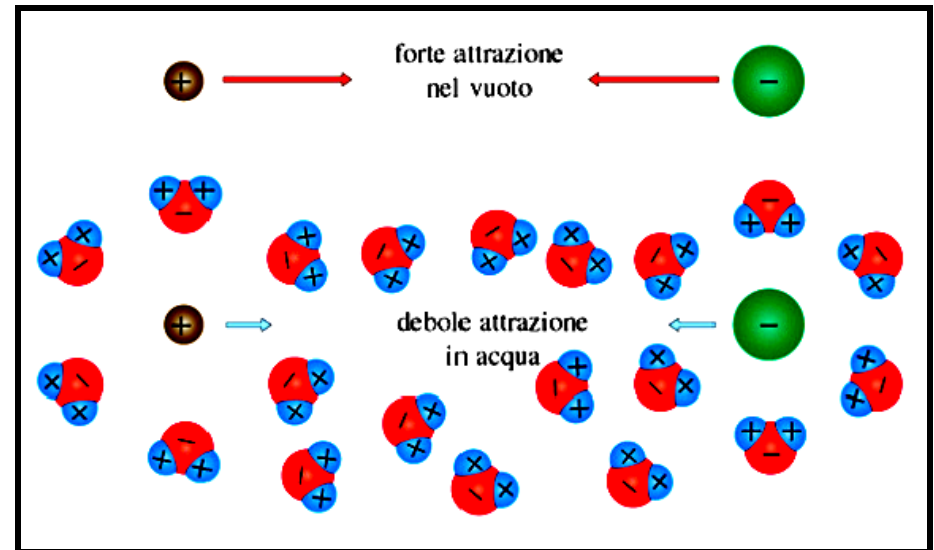


**Forza di Coulomb** →  $F = \frac{q_1 \times q_2}{r^2 \times D}$

cariche degli ioni

distanza fra i due nuclei

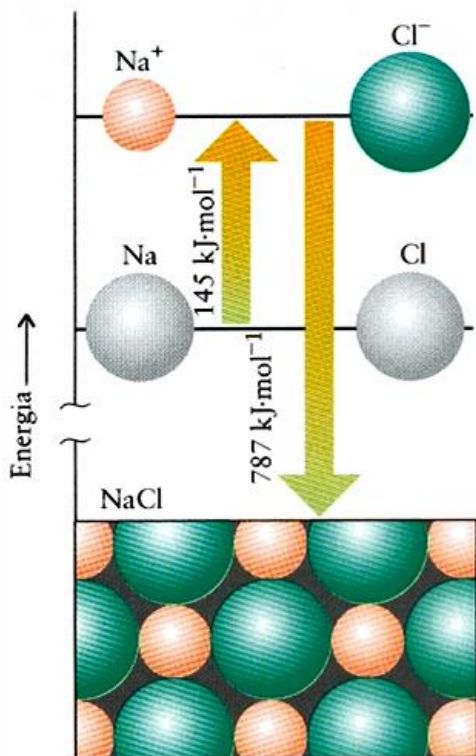
costante dielettrica del mezzo



# FORMAZIONE DEL RETICOLO CRISTALLINO E LEGAME IONICO



**+ 145 kJ/mole**

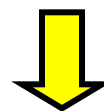


**quantità di energia necessaria per ottenere ioni Na<sup>+</sup> e ioni Cl<sup>-</sup> allo stato gassoso**

**tuttavia:**

**la forte attrazione elettrostatica tra gli ioni di carica opposta porta ad un rilascio di energia pari a -787 kJ/mole detta ENERGIA RETICOLARE con formazione del reticolo cristallino**

**In un cristallo di sale più ioni sono incastonati a formare una ben precisa struttura reticolare in cui uno ione risente dell'attrazione di tutti gli ioni di segno opposto che si trovano intorno ad esso. **Tale situazione permette di superare il problema energetico legato alla formazione di ioni Na<sup>+</sup> e Cl<sup>-</sup> isolati.****

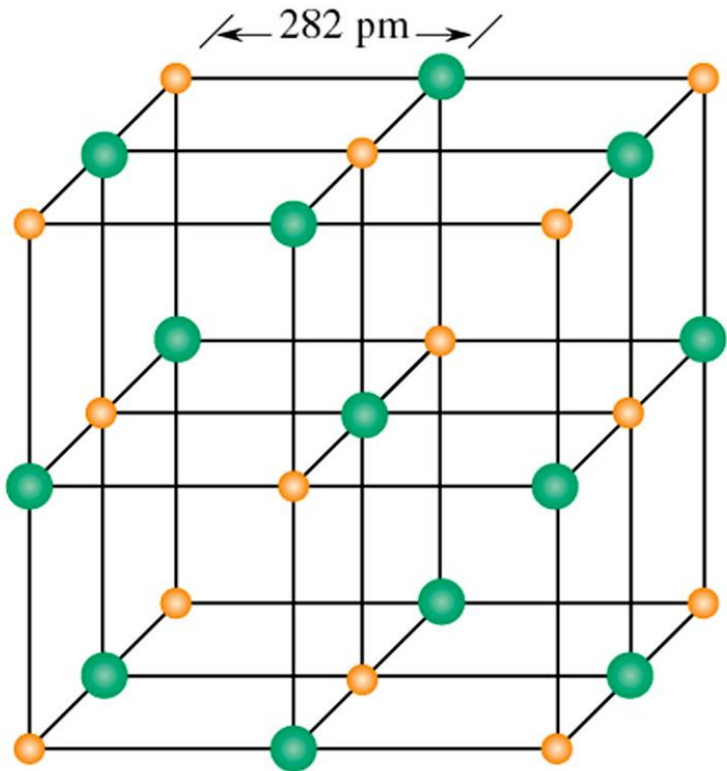


**Nei composti ionici cristallini non è possibile isolare una singola molecola !**

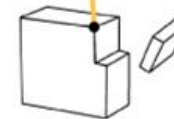
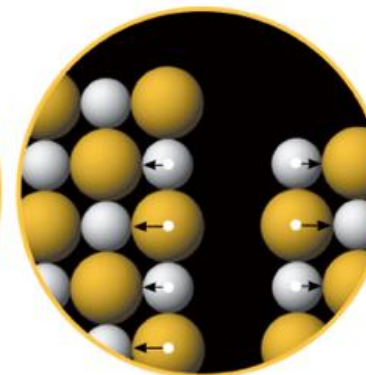
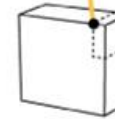
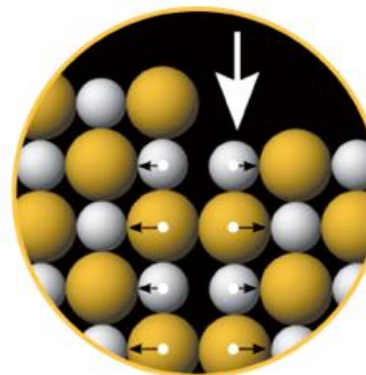
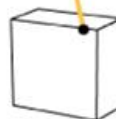
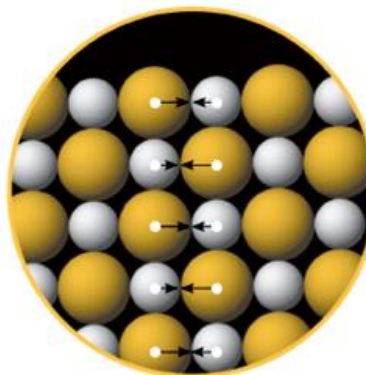
**Nel reticolo cristallino di un solido ionico i nodi reticolari sono occupati da ioni positivi e ioni negativi. Nel cristallo di NaCl i nodi reticolari sono occupati da ioni  $\text{Na}^+$  e da ioni  $\text{Cl}^-$**

  $\text{Na}^+$

  $\text{Cl}^-$



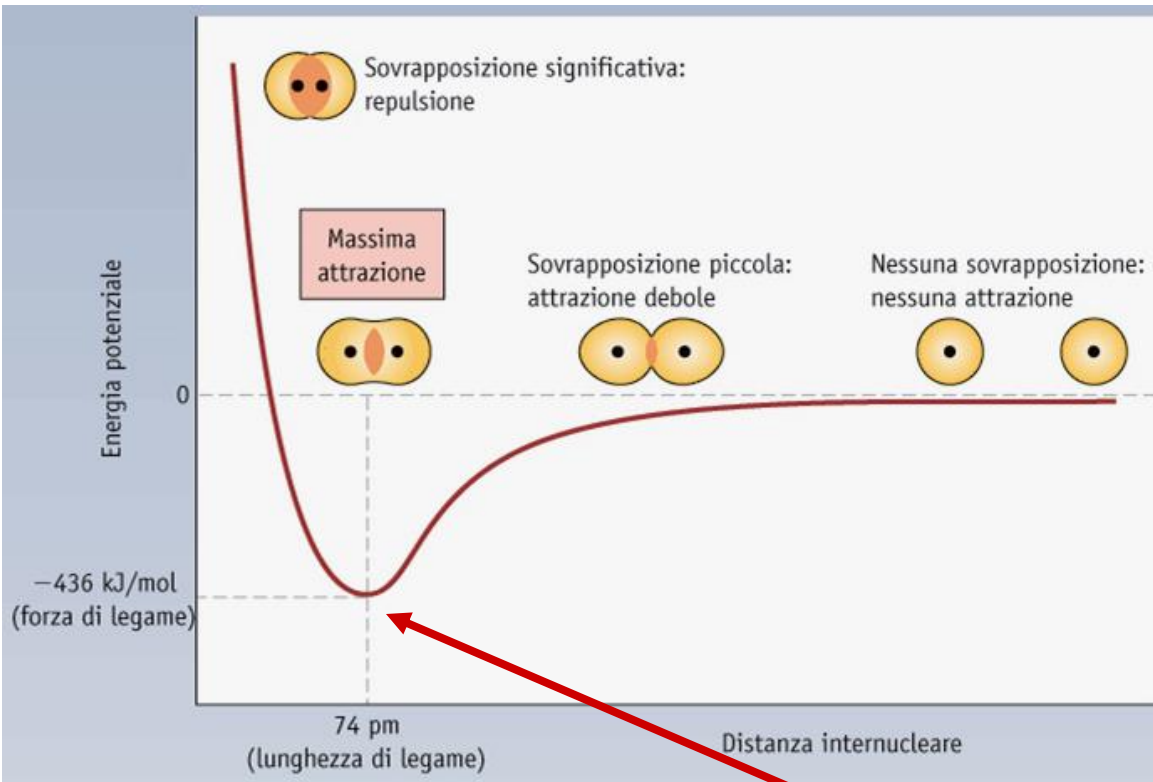
### ROTTURA DEL CRISTALLO DI UN SOLIDO IONICO



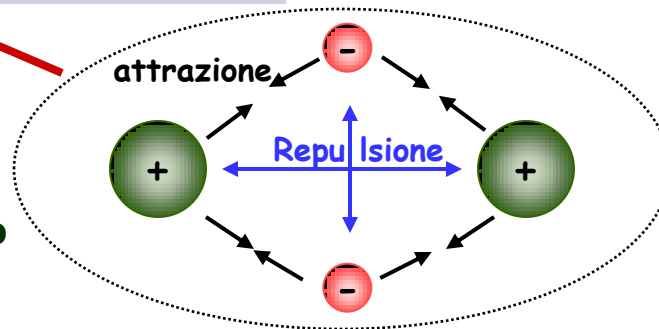
# Legame covalente

Due atomi mettono in compartecipazione i propri elettroni di valenza per formare legami

Variazione dell'energia potenziale durante la formazione del legame H-H a partire da due atomi di idrogeno isolati



I due elettroni di legame hanno il massimo di probabilità di trovarsi tra i due nuclei quando i due orbitali 1S si combinano formando un orbitale molecolare



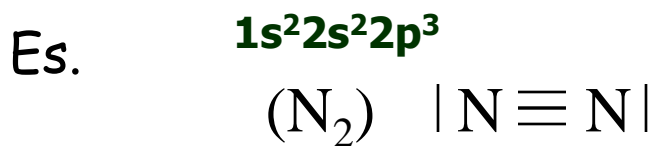
Al minimo di energia avremo:

**MINIME LE FORZE DI REPULSIONE, MASSIME QUELLE DI ATTRAZIONE**

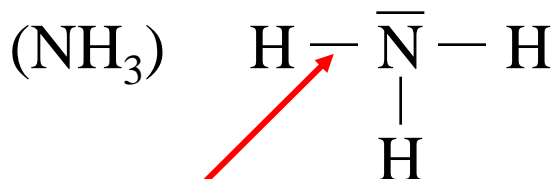


# Teoria di Lewis (regola dell'ottetto)

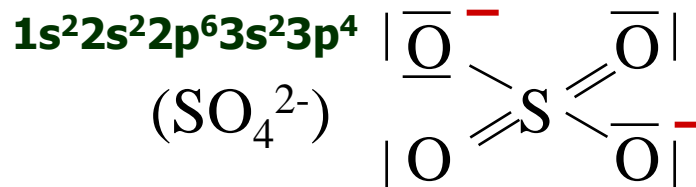
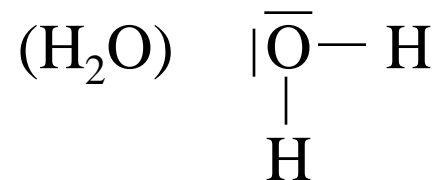
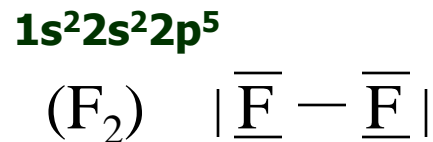
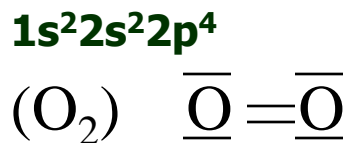
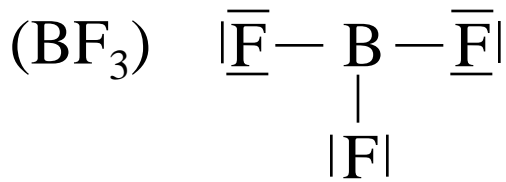
Un atomo forma tanti legami covalenti quanti sono i suoi elettroni spaiati e in modo tale da raggiungere la configurazione elettronica dell'ottetto, tipica dei gas nobili.



coppia solitaria (lone pair)



coppia legante (bond pair)



Per lo S che appartiene al 3° periodo non è valida la regola dell'ottetto; si osserva quindi *l'espansione del guscio di valenza* che utilizza gli orbitali 3d.

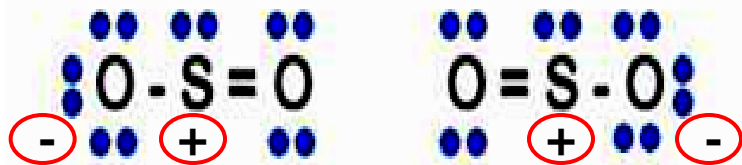
Per il B che appartiene al 2° periodo e presenta 3 elettroni di valenza la regola dell'ottetto non è applicabile. In casi come questi dove vi è deficienza di elettroni la molecola risulta particolarmente reattiva.

## Limiti della regola dell'ottetto

La regola dell'ottetto mal si adatta ad atomi di periodo superiore al secondo ed inoltre non considera la collocazione degli elettroni nelle molecole né la forma delle molecole né il loro livello energetico.

# Strutture di risonanza

Alcune volte si possono avere due o più strutture di Lewis equivalenti per una stessa molecola, ad es.  $\text{SO}_2$

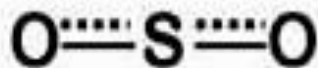


Infatti entrambe :  
-soddisfano la regola dell'ottetto  
-hanno lo stesso numero di legami  
-hanno lo stesso tipo di legame

**Quale è quella corretta ?**

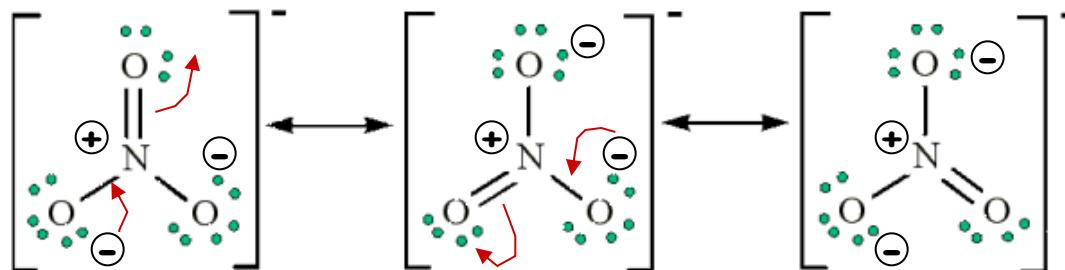
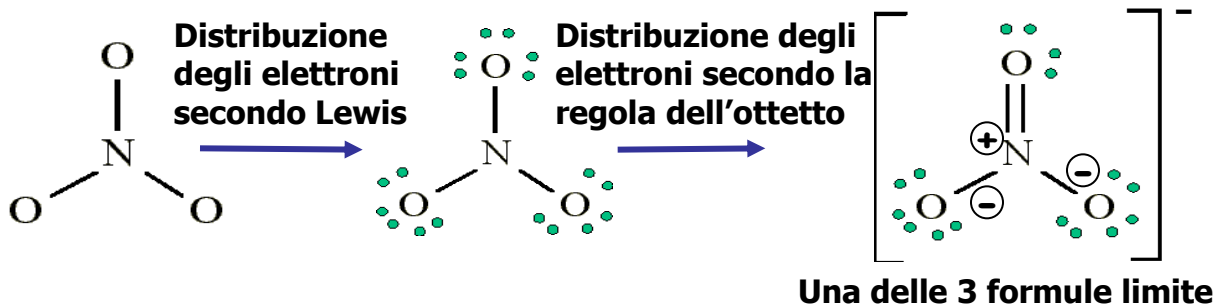


**Entrambe sono corrette !**



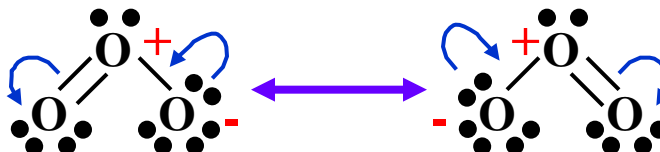
Ciò risulta in una media di 1,5 legami tra ogni O e S.  
(La carica netta della molecola è zero)

## Altro esempio : $\text{NO}_3^-$ (ione nitrato)

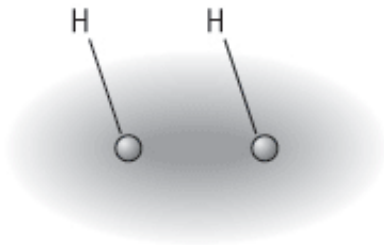


Si definisce **ibrido di risonanza** la media delle formule limiti di risonanza. L'ibrido di risonanza presenta un'energia minore di una qualsiasi delle sue formule limiti di un valore detto **energia di risonanza**.

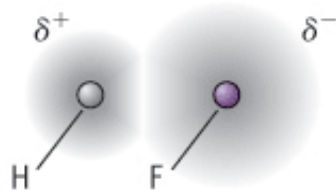
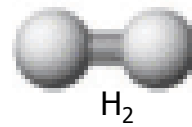
## Altro esempio : $\text{O}_3$ (ozono)



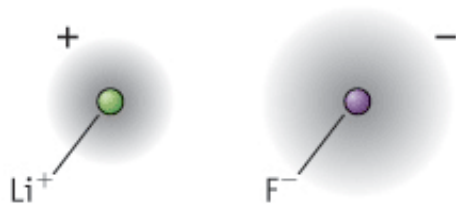
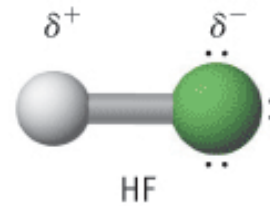
# LEGAMI COVALENTI: NON POLARE E POLARE



Covalente totale

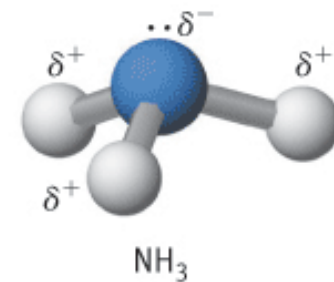
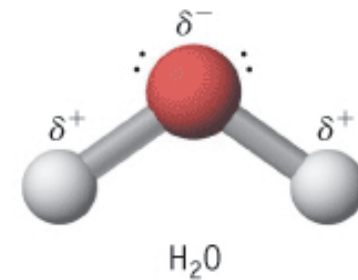


Covalente polare



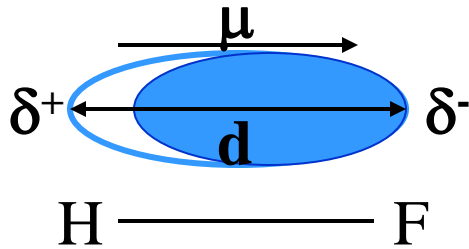
Ionico

ESEMPI DI LEGAME COVALENTE POLARE



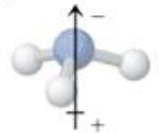
# Polarità dei legami

In base ai differenti valori di elettronegatività degli atomi costituenti la molecola è possibile che i legami di questa risultino *polarizzati*, ossia si formi un *dipolo elettrico* con zone della molecola dove c'è un maggiore addensamento di carica negativa e zone invece, dove la carica positiva prevale.

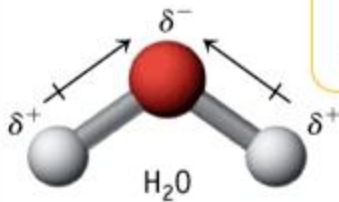


Momento del  
dipolo elettrico ( $\mu$ ):  $\mu = d \times \delta$

Dipolo netto  
 $\mu = 1.47D$

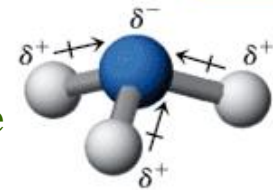


Dipolo netto  
 $\mu = 1.85D$



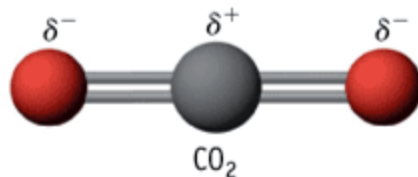
L'acqua è un composto polare

L'ammoniaca  
è un composto polare



NH<sub>3</sub>

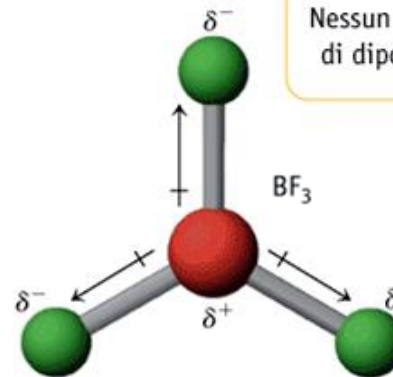
Nessun momento  
di dipolo netto



L'anidride carbonica non è un composto polare !

(la somma vettoriale dei due momenti dipolari è nulla)

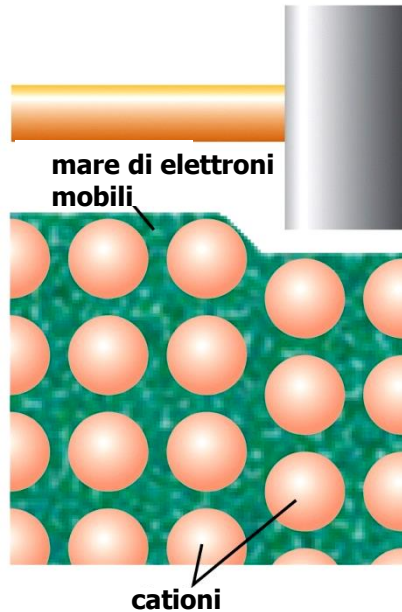
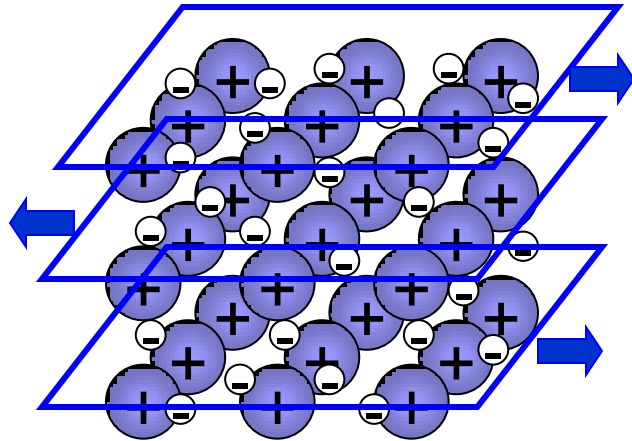
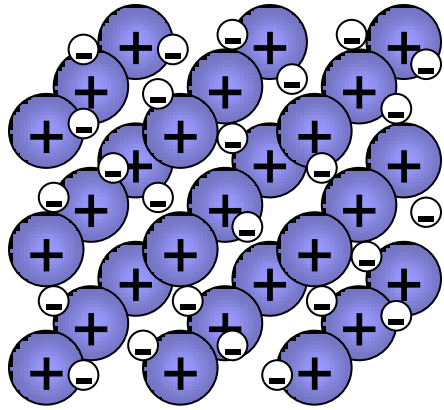
Nessun momento  
di dipolo netto



Il trifluoruro di boro non  
è un composto polare !  
(la somma vettoriale dei tre  
momenti dipolari è nulla)

# Legame metallico

In un metallo, ciascun atomo mette in comune uno o più elettroni dello strato esterno (di valenza) formando ioni positivi e una nube elettronica mobile che avvolge questi ultimi costringendoli a posizioni fisse in un reticolo cristallino. Alle forze di interazione elettrostatica che si stabiliscono tra i cationi e la nuvola elettronica si dà il nome di *legame metallico*.



Lo scorrimento di un piano su un altro è possibile in quanto vi sono gli elettroni delocalizzati che schermano gli ioni positivi.

## Proprietà peculiari dei metalli

- duttilità ( fili)
- malleabilità ( lamine)
- conducibilità elettrica e termica

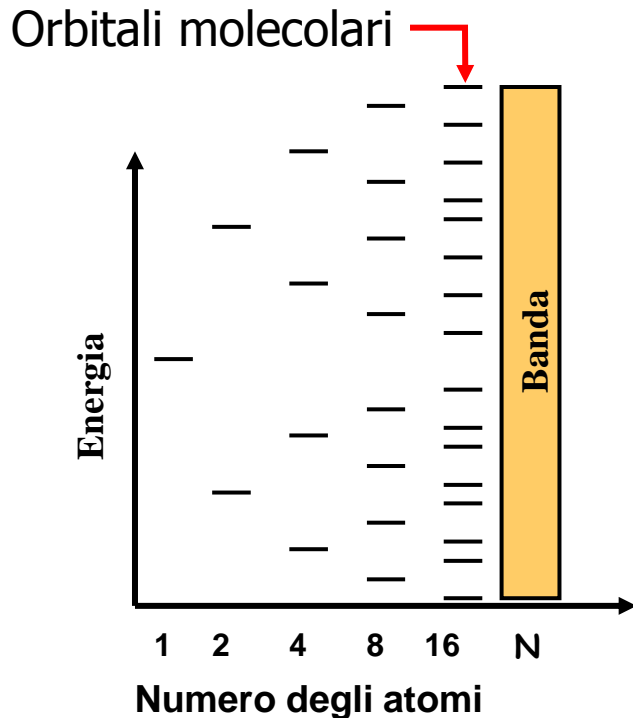


# Considerando il legame metallico secondo la teoria dell'Orbitali Molecolari:

2 orbitali atomici (OA) si combinano matematicamente per dare 2 orbitali molecolari (OM)



quindi per i metalli avremo:  $N$  (OA)  $\rightarrow$   $N$ (OM) con  $N$  numero molto grande



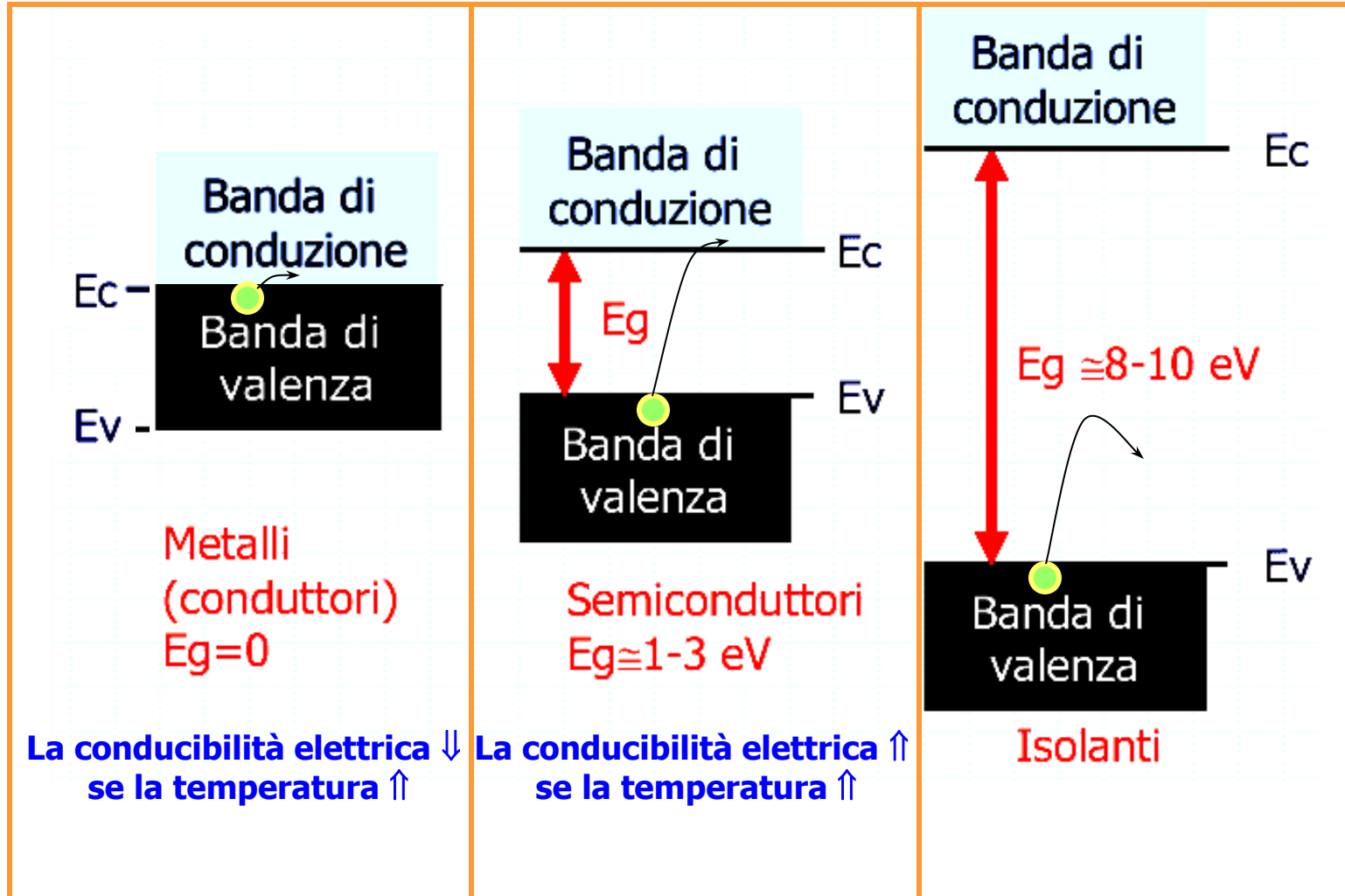
Si formano in tal modo una serie di orbitali molecolari i cui livelli energetici sono molto vicini tra loro. A tale serie pressochè continua si dà il nome di **banda**. Vi possono essere bande di tipo *s*, *p*, *d*, a seconda degli orbitali atomici da cui derivano.

E' possibile anche la presenza di intervalli di energia in cui non cade alcun orbitale e a tali zone prive di bande si da il nome di **lacune di energia**.

Nel **legame metallico tutti gli elettroni di tutti gli atomi** che costituiscono il cristallo sono delocalizzati su una serie di orbitali molecolari (formante una **banda**) ottenuti dagli orbitali atomici di tutti gli atomi.

# Conduttori, Semiconduttori e Isolanti

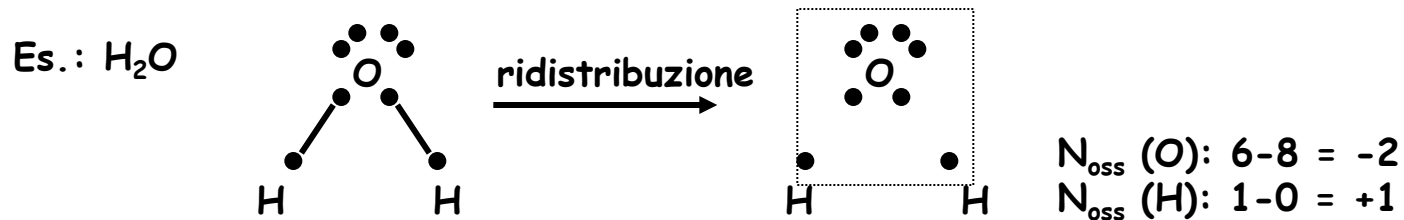
**Eg** = Energy gap  
(lacuna di energia)



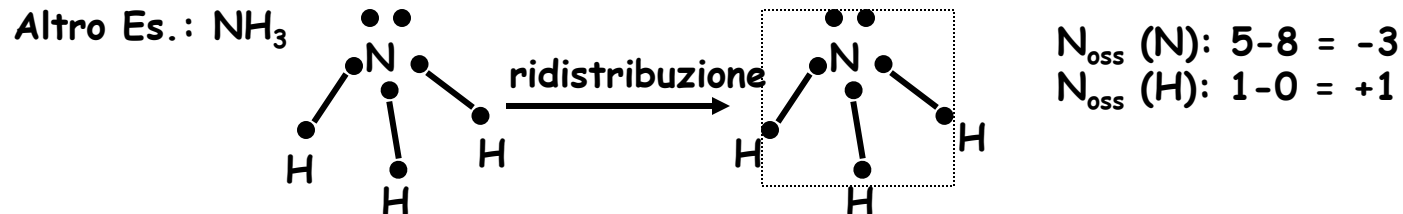


# NUMERO DI OSSIDAZIONE

Il *numero di ossidazione* di un elemento (atomo) in una molecola corrisponde alla carica formale che acquisterebbe l'atomo dopo aver distribuito gli elettroni dei suoi legami chimici sull'atomo più elettronegativo.



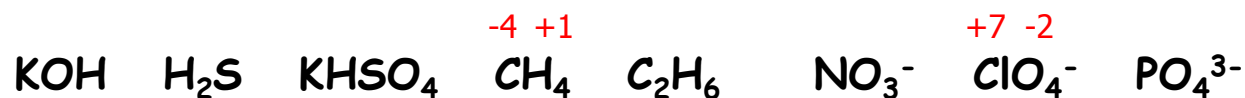
Regola semplice :  $N_{\text{oss}} =$  numero degli elettroni di valenza dell'atomo - numero degli elettroni che complessivamente troviamo sull'atomo dopo la redistribuzione



## REGOLE EMPIRICHE PER LA DETERMINAZIONE DEL N. O.

1. Il n.o. degli atomi nelle sostanze elementari è zero.
2. Alcuni elementi hanno sempre lo stesso n.o. invariabilmente in tutti i loro composti:  
Li , Na , K , Rb , Cs : +1      Be , Mg , Ca , Sr , Ba , Ra , Cd , Zn : +2  
B, Al : +3      F : -1      H : +1 (o -1)      O : -2 (o -1)
3. Tutti gli elementi nei composti hanno  $N-8 \leq \text{n.o.} \leq N$  , con N uguale al gruppo di appartenenza.
4. In ogni composto la somma dei n.o. di tutti gli atomi che lo compongono è uguale a zero se il composto è elettricamente neutro o al valore della sua carica elettrica se il composto è una specie ionica mono o poliatomica.

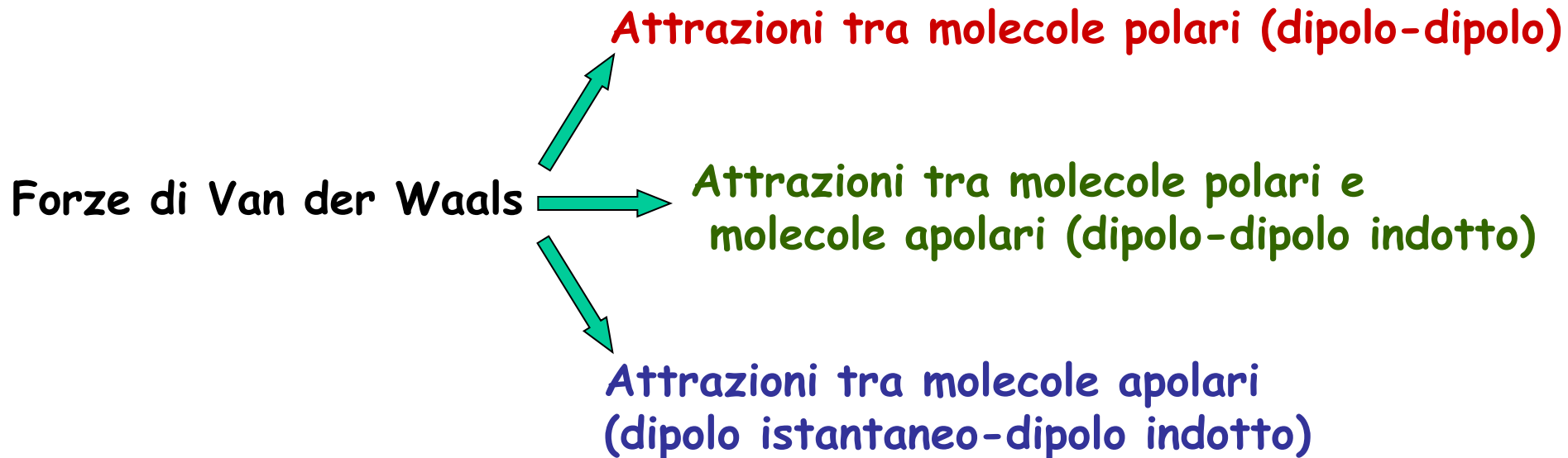
Es.:



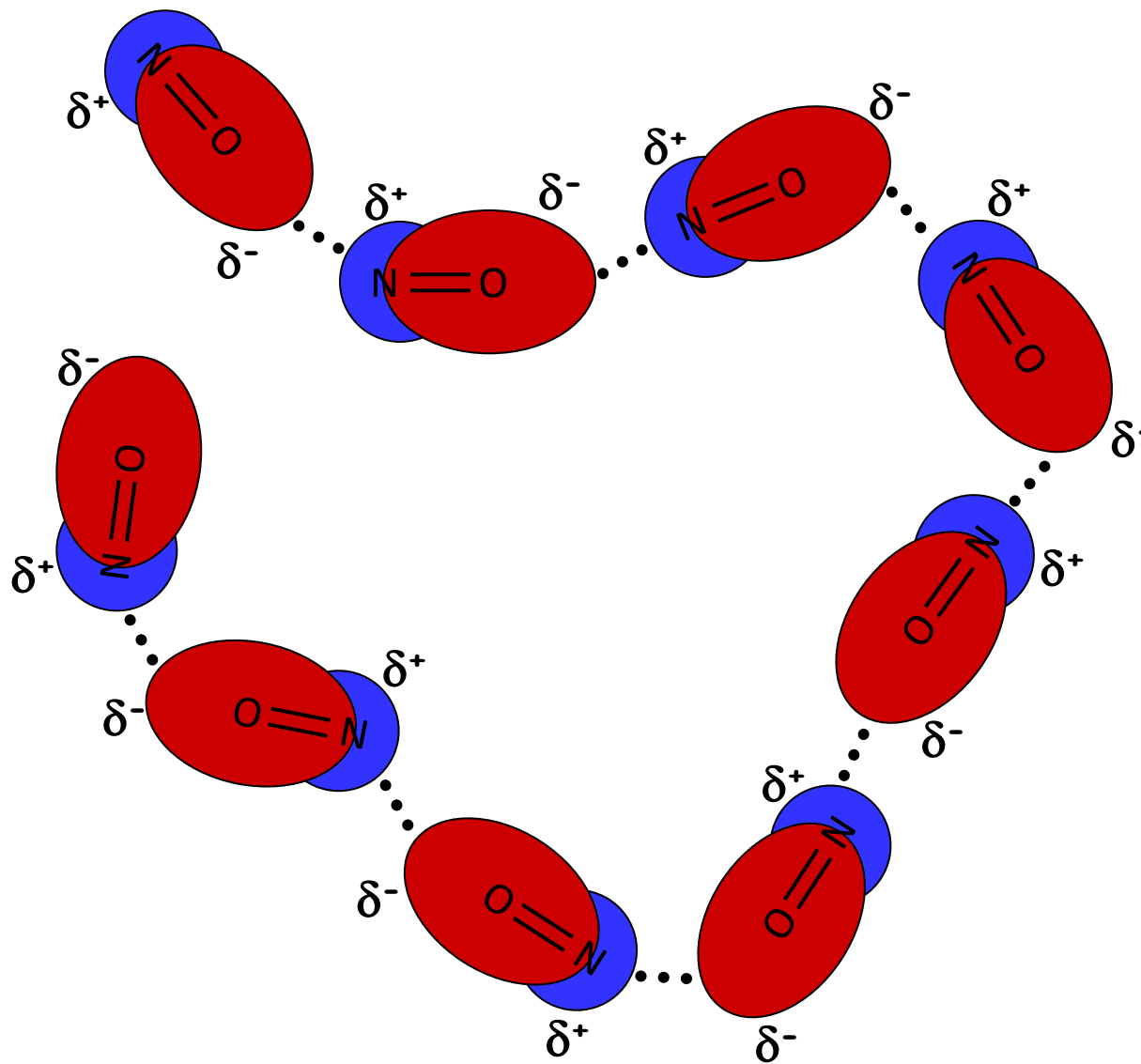
# Forze di Van der Waals

Sono forze di attrazione elettrostatica intermolecolari che si stabiliscono solo quando le molecole si trovano a breve distanza una dall'altra, circa 2 - 5 Angstrom.

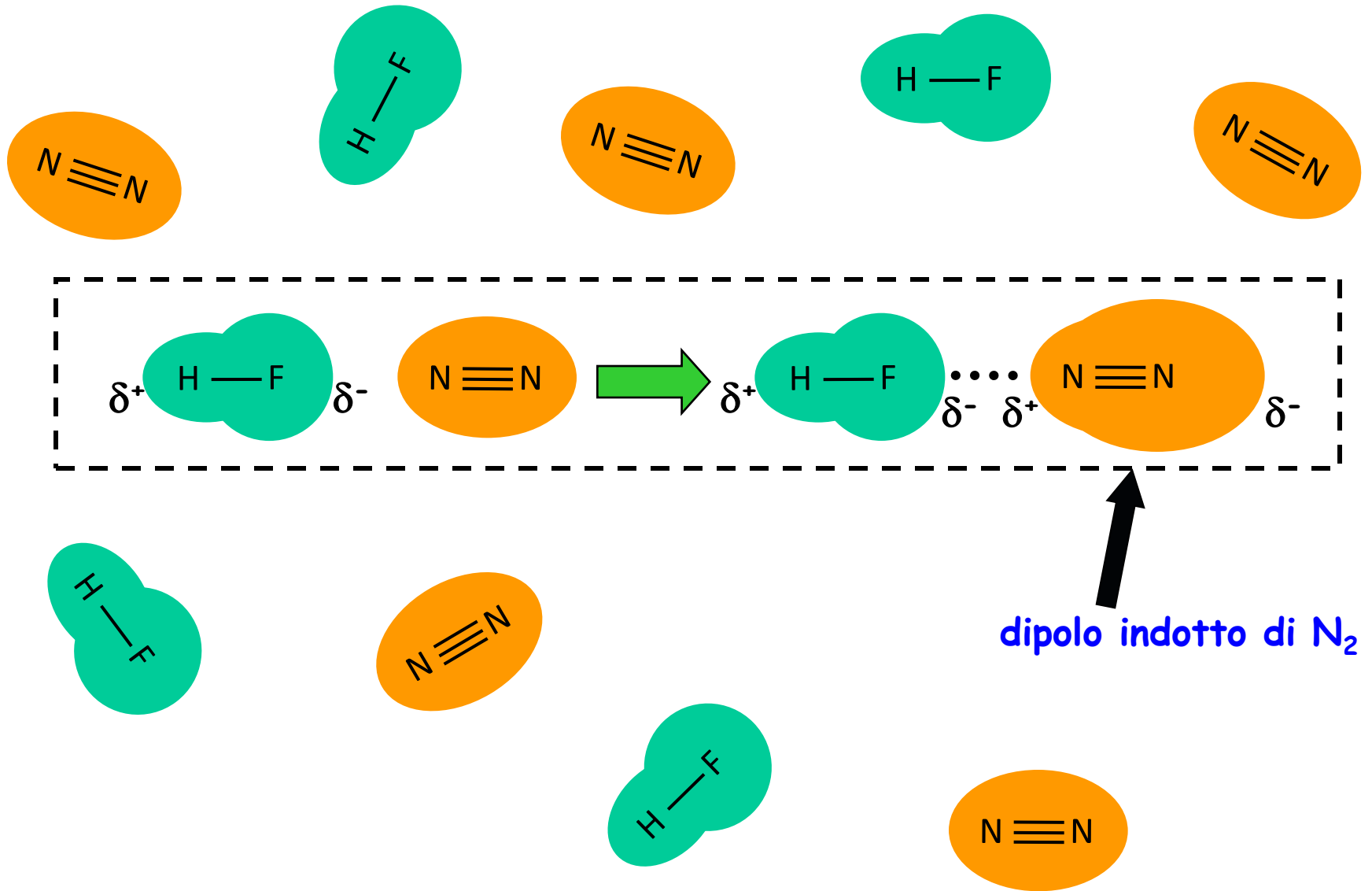
Possono essere interessate a tali forze sia molecole allo stato gassoso, che liquido o solido. Tali forze sono in genere, labili e quindi estremamente deboli; l'energia di legame non supera infatti 6-8 KJ/mole.



## Attrazioni dipolo-dipolo ( $\text{CHCl}_3$ , $\text{NO}$ , $\text{SO}_2$ )



# Attrazioni dipolo-dipolo indotto ( tra HF e N<sub>2</sub> )

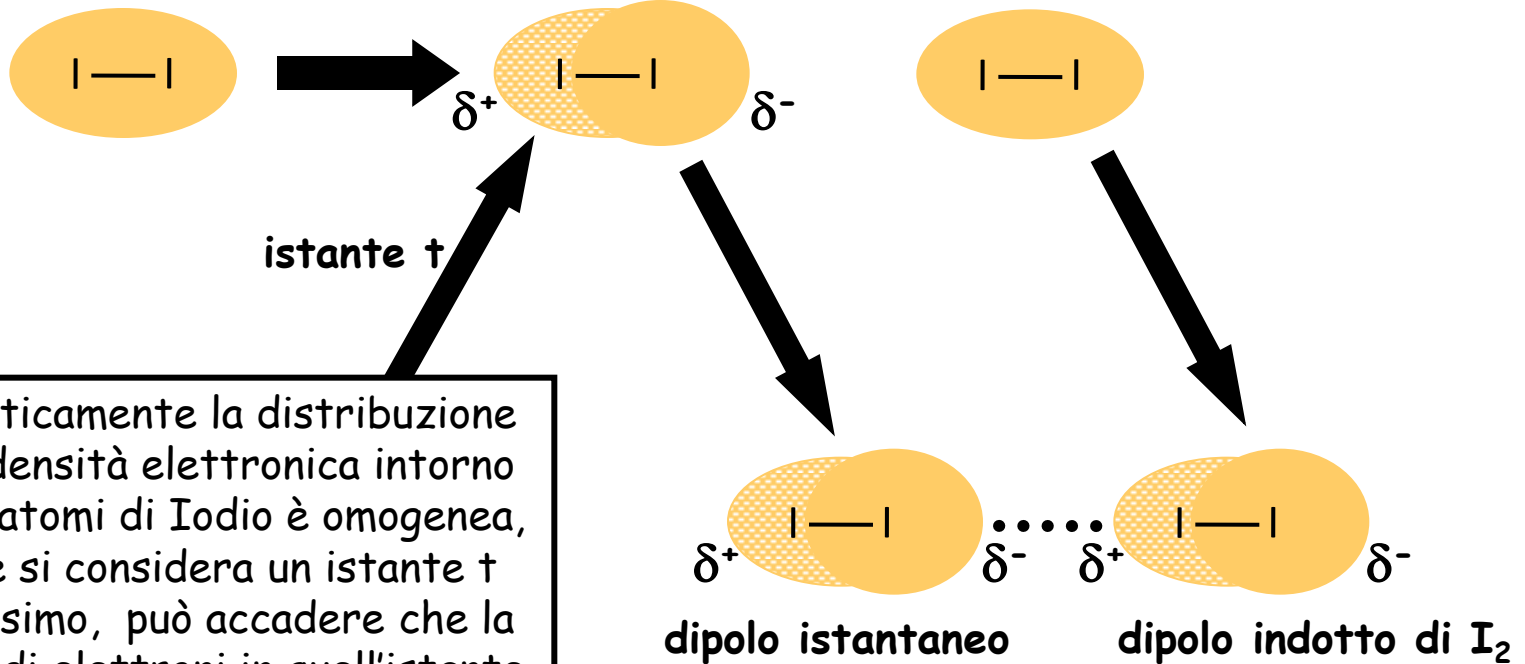


# Attrazioni dipolo istantaneo-dipolo indotto ( He , N<sub>2</sub> , O<sub>2</sub> , I<sub>2</sub> ) (Forze di dispersione o di London)

molecola di Iodio (I<sub>2</sub>)

dipolo istantaneo

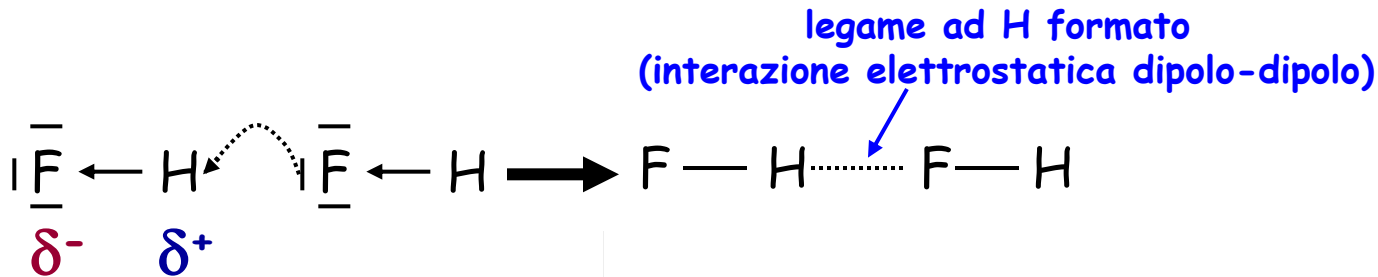
2<sup>a</sup> molecola di I<sub>2</sub>



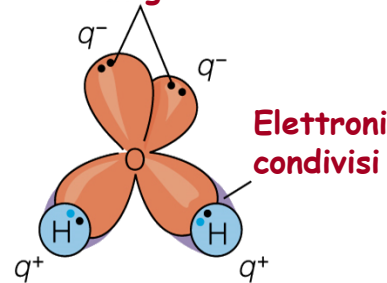
Statisticamente la distribuzione della densità elettronica intorno ai due atomi di Iodio è omogenea, ma se si considera un istante t brevissimo, può accadere che la nuvola di elettroni in quell'istante sia più spostata verso una zona diventando così asimmetrica

# LEGAME AD IDROGENO

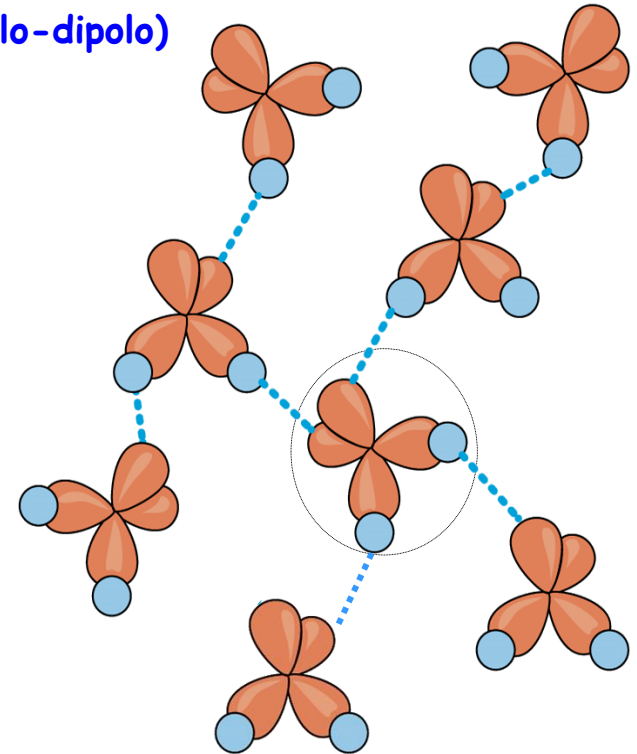
È un legame in cui un atomo di idrogeno è messo in compartecipazione fra due altri atomi. L'atomo accettore dell'idrogeno possiede una parziale carica negativa che attrae l'atomo di idrogeno; è il caso quindi di **atomi molto elettronegativi** come ad esempio **F, Cl, O, N**. L'energia di legame varia da 12 a 28 KJ/mole.



Doppietto elettronico di non legame



A) Struttura elettronica di una molecola d'acqua.

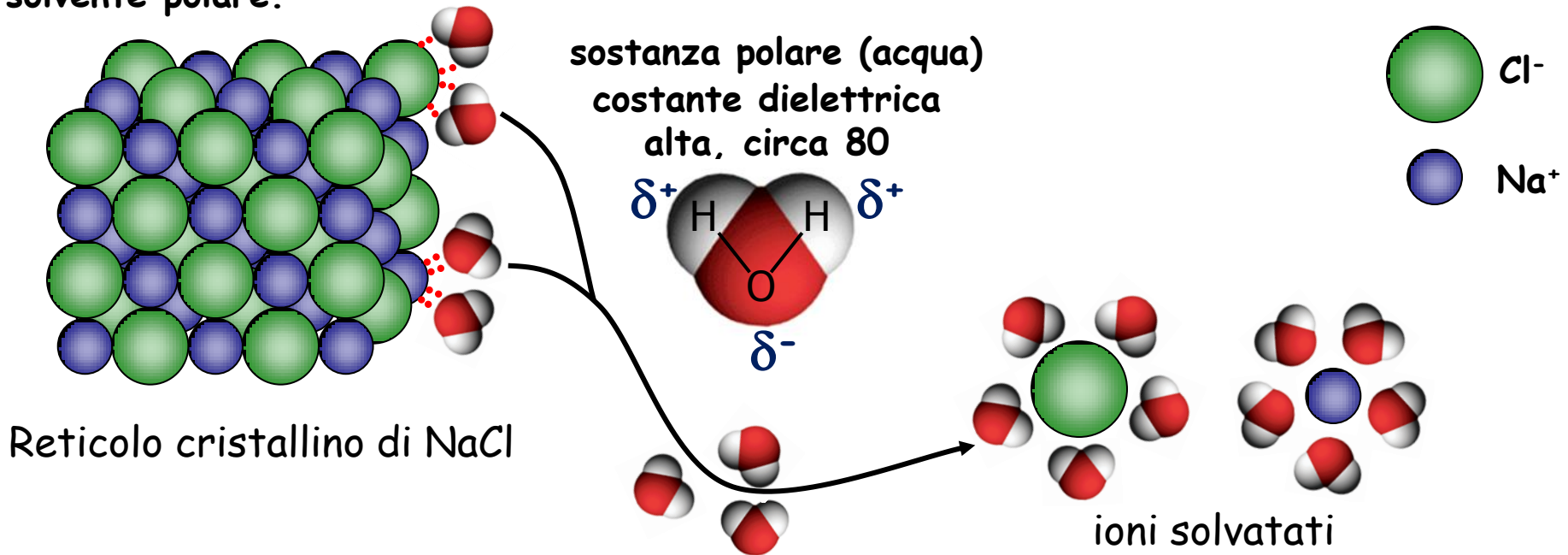


B) Legami idrogeno nell'acqua. Una molecola d'acqua può formare al massimo 4 legami a idrogeno con altrettante molecole d'acqua.

I legami ad idrogeno sono fondamentali nello stabilizzare le strutture di alcune biomolecole importanti come gli acidi nucleici e le proteine.

# Legame ione-dipolo (solvatazione di un sale)

E' un legame di natura elettrostatica che si forma in genere tra un composto ionico e una sostanza polare. Tale legame porta ad esempio alla solvatazione degli ioni in un certo solvente polare.



La forza di attrazione ione-dipolo dipende da:

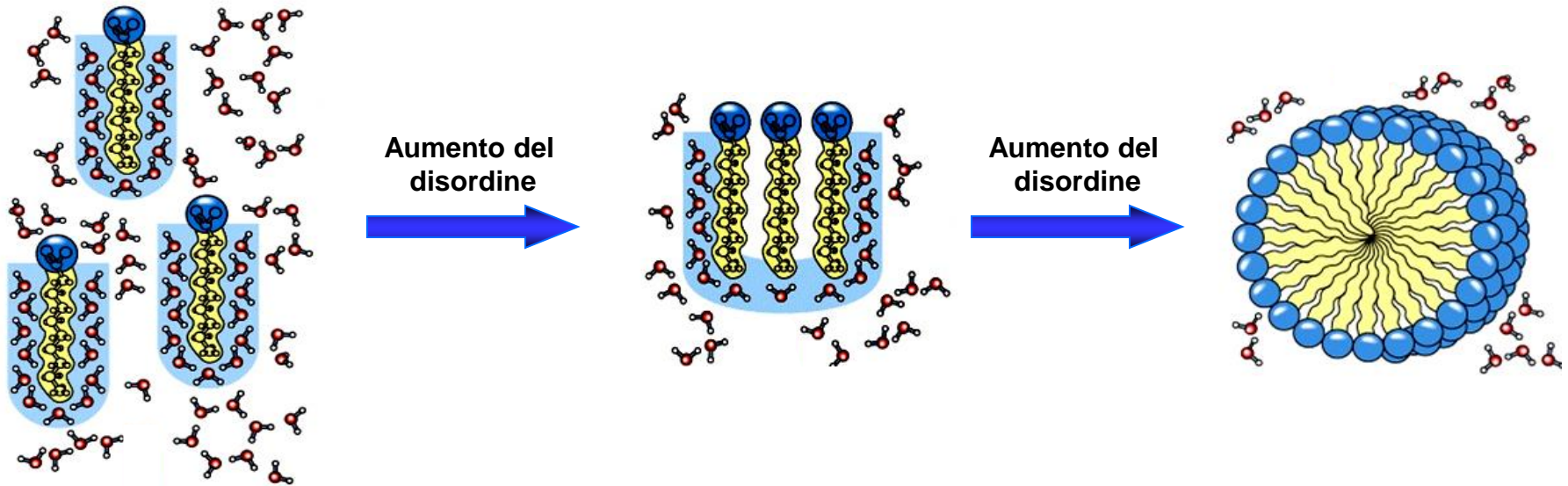
- **Distanza ione-dipolo:** più vicini si trovano lo ione e il dipolo, più forte sarà l'attrazione.
- **Carica dello ione:** più alta è la carica, maggiore è l'attrazione.
- **Dimensioni del dipolo:** maggiore è la grandezza del dipolo, più forte sarà l'attrazione.



# Interazioni idrofobiche

Forze che tendono a riunire molecole o gruppi non polari quando si trovano a contatto con molecole polari, come ad esempio l'acqua.

Causa della aggregazione delle molecole non polari è **l'aumento del disordine totale** (disordine delle molecole d'acqua + disordine delle molecole non polari)



I sistemi tendono sempre verso lo stato più disordinato cui compete la maggiore stabilità e quindi la minore energia possibile

Le forze idrofobiche sono importanti nello stabilizzare la struttura tridimensionale di determinate macromolecole di rilevante interesse biologico come gli acidi nucleici e le proteine.