

‘compound’ of *connected* (‘bonded’) alternative conceptions, rather than just an assortment of discrete ideas - that is applied widely (see Figure 2). It leads to seeing ionic and covalent bonding as a dichotomy that makes learning about bond polarity difficult, and which may suggest that hydrogen bonding is covalent, and that metallic bonding, solvation forces, and intermolecular interactions, must be something other than chemical bonding.

This ‘octet’ conceptual framework (which subsumes the molecular framework for ionic bonding) leads to students making incorrect, and sometimes extreme, predictions of ionic stability (so  $\text{Na}^+$  is often considered chemically stable as it has an outer shell octet - despite being a highly charged metallic cation). It is also applied in explaining patterns in ionisation enthalpies: so, for example, explaining that Ne and Ar have the highest ionisation energies in their periods because of some mystical special stability of their octet structures (despite these elements fitting with the general ‘trends’ of increasing first ionisation energy with increasing core charge).

Being a ‘compound’ of linked and mutually reinforcing conceptions [4], these alternative ideas are especially insidious, and so are often retained despite teaching.

### References

- [1] K. S. Taber, *Student Thinking and Learning in Science: Perspectives on the nature and development of learners’ ideas*, Routledge, New York, 2014.
- [2] K. S. Taber, *Chemistry Education Research and Practice*, 2013, **14**(2), 156-168; doi:10.1039/C3RP00012E
- [3] K. S. Taber, *International Journal of Science Education*, 1998, **20**(5), 597-608.
- [4] K. S. Taber, in *Concepts of Matter in Science Education* (Eds. G. Tsaparlis, H. Sevian), pp. 391-418, Springer, Dordrecht, 2013.

### Video



Per il video della relazione completa, clicca il seguente link: <https://science-education-research.com/publications/miscellaneous/alternative-conceptions-of-the-chemical-bond>



### Donato Monti

Dipartimento di Chimica – Università degli Studi La Sapienza di Roma

✉ donato.monti@uniroma1.it

# L’acqua: una molecola, due legami, tre atomi. Quattro modi per descriverla

**L**a molecola dell’acqua è essenziale per la vita sul nostro pianeta, almeno per come la conosciamo. Per questo nella mia lezione ho voluto prendere spunto da questa molecola per ripercorrere brevemente l’approccio che generalmente segue per introdurre i concetti di legame covalente e struttura molecolare nelle mie lezioni di Chimica Generale per gli studenti del primo anno del Corso di Laurea in Chimica. I testi di riferimento di livello universitario trattano gli argomenti presentati in maniera sostanzialmente equivalente, anche se con accenti diversi [1].

Per la determinazione della struttura molecolare utilizzo a livelli successivi di complessità di descrizione del legame chimico: 1) formule (o strutture) di Lewis,

ovvero del legame formato per condivisione di una coppia di elettroni; 2) teoria di Gillespie (VSEPR), basata sulla minima energia di repulsione delle coppie elettroniche esistenti sulla molecola in seguito alla formazione dei legami; 3) ibridazione (teoria del legame di valenza, L. Pauling); 4) teoria degli orbitali molecolari (MO). Vedremo che i primi due modelli, sebbene offrano un utilissimo strumento per la determinazione della struttura generale (numero dei legami e loro disposizione spaziale tridimensionale), si fermano ad un piano di descrizione puramente qualitativo, senza fornire previsioni relative a distanze ed energie di legame, fattori chiave per l’interpre-

tazione e la previsione della stabilità e della reattività “chimica” di una molecola.

### 1) Determinazione delle formule di Lewis

Il modello di Lewis richiede: a) la valutazione del numero degli elettroni di valenza totali, al quale contribuiscono tutti gli atomi che costituiscono la molecola; b) l'impiego di una coppia di elettroni per la formazione di ogni legame, perfettamente condivisi nel caso di legame covalente puro; c) la disposizione degli elettroni restanti, a coppie sull'atomo più elettronegativo, fino, se possibile, al raggiungimento dell'ottetto elettronico. È chiaro che, a questo primo livello di trattazione, non vi è nessuna indicazione energetica sulle possibili disposizioni degli atomi che compongono la molecola, cioè disposizione lineare o ortogonale dei legami O-H nella molecola di acqua:



### 2) Previsione della geometria tridimensionale mediante la Teoria VSEPR

La teoria VSEPR (acronimo per Valence Shell Electron-Pair Repulsion) è basata sulla minimizzazione dell'energia di repulsione tra le coppie elettroniche presenti nella molecola (coppie solitarie e coppie di legame). In realtà il testo originale di Gillespie [2] mette in risalto anche l'importanza del Principio di Esclusione di Pauli, che offre una spiegazione razionale del coinvolgimento di “coppie di elettroni” nella formazione dei legami. Nel nostro caso, i due legami O-H e i due *lone pair* localizzati sull'atomo di ossigeno danno luogo ad un “assetto tetraedrico” delle densità elettroniche, prevedendo un angolo di legame H-O-H di 109.5°. La maggiore densità elettronica dei *lone pair* provocherà un maggiore effetto repulsivo causando un restringimento dell'angolo di legame H-O-H, al valore di 104.5°.

### 3) Teoria del Legame di Valenza; Ibridazione

Il concetto di ibridazione (o ibridizzazione) fu sviluppato da Linus Pauling nell'alveo della Teoria del Legame di Valenza (VB) [3]. Questo concetto offre una conveniente interpretazione delle strutture molecolari, in termini di geometria, distanze ed angoli di legame, energie di legame. Il processo di formazione di orbitali ibridi porta ad un consistente aumento di energia (dell'ordine delle centinaia di kJ/mol), che però viene ampiamente ripagato dalla formazione di legami più forti (sovrapposizione ottimale) e di-

rezionali (minimizzazione delle energie di repulsione elettronica).

Un punto su cui occorre prestare molta attenzione durante la lezione è la descrizione del processo di ibridazione come “promozione” di uno degli elettroni 2s al livello 2p (ad es. nell'atomo di C il passaggio dalla configurazione  $2s^2 2p^2$  alla configurazione  $2s^1 2p^3$ ). Questo approccio rischia di diventare fuorviante; infatti, per l'atomo di O si tratterebbe di una promozione da  $2s^2 2p^4$  a  $2s^1 2p^5$ , che non darebbe luogo ad un aumento del numero degli elettroni spaiati, e quindi dei legami.

### 4) Trattazione della struttura mediante la Teoria degli Orbitali Molecolari

La trattazione della struttura dell'acqua mediante la teoria MO non può essere affrontata in una lezione rivolta agli studenti del primo anno. Alcuni concetti, che saranno introdotti nelle lezioni successive in una trattazione qualitativa della teoria, potranno però essere richiamati per offrire agli studenti un quadro più ampio del legame chimico e per focalizzare la loro attenzione sul fatto che non è sufficiente un solo approccio, un solo modello, ma tutti insieme sinergicamente concorrono alla rappresentazione e previsione della struttura molecolare.

Nel quadro della teoria MO il processo di ibridazione è il prodotto naturale della costruzione di un orbitale ibrido a partire dalla combinazione lineare di orbitali atomici. Nel caso dell'atomo di ossigeno, a causa degli effetti di schermo, si ha una differenza di energia tra gli orbitali 2s e 2p di circa 1580 kJ/mol. Questo porterà nella formazione dell'ibrido  $sp^3$  ad un minore contributo della funzione 2s rispetto a quella a maggiore energia 2p. Nel caso dell'acqua ( $\theta = 104.5^\circ$ ), gli orbitali ibridi coinvolti nel legame hanno un 20 % di carattere s e un 80 % di carattere p.

### Bibliografia

- [1] P. Atkins, L. Jones, *Principi di Chimica*, Ed. Zanichelli, Bologna, 2006; P. Silvestroni, *Fondamenti di Chimica, XI edizione*, CEA, Bologna, 2020; D. W. Oxtoby, H. P. Gills, A. Champion, *Chimica Moderna*, EdiSES, Napoli, 2013.
- [2] R. J. Gillespie, P. L. A. Popelier, *Chemical Bonding and Molecular Geometry*, Oxford University Press, 2001.
- [3] L. Pauling. *The Nature of the Chemical Bond*, Cornell University Press., 1960.

### Video



Per il video della relazione completa, clicca il seguente link:  
<https://youtu.be/uZKBfgqQwkU>