



Legami fra atomi e interazioni fra molecole. Concetti e didattica.

Riassunti

Eleonora Aquilini e Antonio Testoni

Divisione Didattica, Società Chimica Italiana

ele.aquilini6@gmail.com ajteston@tin.it

Teoria elettronica della valenza e natura del legame chimico secondo Lewis Un esempio di approccio storico/epistemologico

Il nostro contributo vuol essere un esempio di un approccio storico/epistemologico ad un tema fondamentale nella trattazione del legame chimico: il modello di Lewis. La proposta è volta a mettere in luce quanto l'esame del contesto teorico e sperimentale, che ha caratterizzato la nascita di quel modello/teoria, sia centrale per impostare una corretta ed efficace trasposizione didattica.

Luigi Fabbrizzi

Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Pavia

luigi.fabbrizzi@unipv.it

Oltre la molecola

Tutte le molecole possono comportarsi da dipoli, permanenti, indotti o istantanei, e per questo possono interagire tra loro con forze di natura elettrostatica genericamente definite di Van der Waals, tipicamente adirezionali. Si tratta di interazioni di energia inferiore almeno di un ordine di grandezza a quella dei legami covalenti. Il bilancio tra l'energia intermolecolare e l'energia cinetica determina lo stato di aggregazione delle sostanze alle varie temperature. Un ruolo particolare è giocato del legame di idrogeno, forte e direzionale, in cui un idrogeno interfaccia due atomi di elevata elettronegatività. Direzionalità e reversibilità del legame di idrogeno sono alla base dell'origine della vita e dell'evoluzione degli esseri viventi.

Michele A. Floriano

Dip. di Scienze e Tecnologie Biologiche Chimiche e Farmaceutiche, Università degli Studi Palermo

michele.floriano@unipa.it

Mariano Venanzi

Dipartimento di Scienze e Tecnologie Chimiche, Università degli Studi Tor Vergata

venanzi@uniroma2.it

Giovanni Villani,

Istituto di Chimica dei Composti Organometallici - CNR, Pisa

villani@pi.iccom.cnr.it

La natura del legame covalente e i moderni metodi computazionali

Il concetto di legame chimico, e di quello covalente in particolare, nasce nell'Ottocento e, quindi, prima della Meccanica Quantistica. Esso, tuttavia, è stato notevolmente modificato dall'introduzione di questa teoria fisica e collegato principalmente alla componente elettronica della molecola. L'attuale concetto di legame covalente, infatti, non può prescindere da un'interpretazione quantistica della densità elettronica della molecola, ma presenta delle problematiche specifiche perché tale caratteristica elettronica non è sempre facilmente collegabili alle osservabili quantistiche e non sempre è visualizzabile in funzione dei legami chimici.

La chimica quantistica attuale è incentrata principalmente nella descrizione della parte elettronica delle molecole e si collega, quindi, strettamente al concetto di legame chimico. La descrizione quantistica della

densità elettronica di molecole complesse è infattibile in maniera esatta e la maggior parte dei moderni metodi computazionali rappresentano differenti approcci e approssimazioni alla risoluzione di tale problema. La natura del legame covalente verrà discussa partendo dalle proprietà di legame delle molecole H_2^+ e H_2 , due sistemi che, pur nella loro semplicità, permettono di affrontare e chiarire i concetti fondamentali del problema.

Elena Ghibaudi

Dipartimento di Chimica, Università degli Studi Torino

elena.ghibaudi@unito.it

Uno sguardo epistemologico sul concetto di legame chimico

Il concetto di legame sarà discusso adottando una prospettiva di tipo epistemologico.

La lezione, in forma dialogata, proporrà alcune questioni pertinenti l'origine, gli scopi conoscitivi, la natura del concetto di legame e il suo rapporto con i modelli nei quali si articola con l'obiettivo di evidenziare l'apporto della riflessione epistemologica alla didattica disciplinare.

Donato Monti

Dipartimento di Chimica, Università degli Studi di Roma La Sapienza

donato.monti@uniroma1.it

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

L'acqua è, come ci insegnano a scuola, una sostanza inodore, incolore ed insapore. Malgrado la sua apparente difficoltà ad essere percepita dai nostri sensi (a parte la fastidiosa sensazione di "bagnato" che proviamo ogni volta che in una giornata piovosa dimentichiamo incautamente a casa l'ombrello ...) essa non solo è una molecola indispensabile per la vita (anzi, è LA MOLECOLA della vita), ma costituisce un valido paradigma per l'approccio alla definizione di una struttura molecolare.

In questa presentazione verrà affrontato il metodo usato a lezione (Chimica Generale per studenti universitari del primo anno) per la definizione della sua struttura partendo dall'approccio della formazione del legame per condivisione di elettroni (i "puntini" di Lewis), alla disposizione spaziale come conseguenza della minimizzazione delle repulsioni elettroniche (teoria VSEPR), alla ottimizzazione della struttura in termini di energia e distanze di legame (teoria VB e ibridazione). Verrà inoltre dato un accenno alla descrizione mediante Teoria degli Orbitali Molecolari e alle strutture organizzate che le molecole di acqua possono formare in virtù delle loro peculiari caratteristiche chimico-fisiche.

Keith S. Taber

Faculty of Education, University of Cambridge, UK

kst24@cam.ac.uk

A 'compound' of learning impediments: alternative conceptions of the chemical bond

Chemical bonding is an abstract topic that concerns invisible processes occurring at a scale far removed from direct observation, so there is no mystery that it is an area that many learners find challenging. Research has identified among learners a range of alternative conceptions relating to bonding. Some of the most common 'misconceptions' are often linked into an especially seductive conceptual framework. This lecture will discuss some of the most widespread student ideas about bonding, and also consider why these are often held tenaciously even (indeed, sometimes especially) after instruction. The presentation will discuss the likely origins of these conceptions and implications for teaching the topic.

Giovanni Villani

Istituto di Chimica dei Composti Organometallici - CNR, Pisa

villani@pi.iccom.cnr.it

Struttura e forma molecolare

I concetti di "struttura" e di "forma" molecolare sono utilizzati in tutti gli ambiti della chimica e spesso sono considerati come sinonimi. Tali non sono e questo può generare confusione nell'insegnamento della chimica.

La differenziazione tra questi due concetti, inoltre, aumenta nel passaggio dalle molecole con pochi atomi alle macromolecole, generando ulteriore confusione in biochimica.

Il concetto di struttura molecolare ci dà informazioni sull'organizzazione interna delle interazioni tra i costituenti atomici di una molecola. In particolare, tale concetto si rapporta al concetto di legame chimico. All'interno di una molecola, infatti, sebbene tutti i costituenti atomici interagiscano, alcune interazioni tra coppie di atomi sono privilegiate e portano a differenziare tutte le coppie di atomi della molecola in quelle legate e non-legate. La formula di struttura di una sostanza mette proprio in evidenza tutte le coppie legate degli atomi costituenti. Essendo il concetto di struttura molecolare un descrittore dell'interno di una molecola, tale concetto dipende poco dall'ambiente in cui la molecola è situata.

La forma di un oggetto macroscopico è identificata dalla sua superficie esterna e, caratterizzata da un suo numero discreto di punti, può essere riportata in un grafico tridimensionale. Nel caso di una molecola, la sua superficie esterna di contorno può essere identificata solo facendo riferimento ad un modello, introdotto per mettere in evidenza particolari proprietà della molecola. Il concetto di "forma molecolare" è, quindi, dipendente dal modello e dalle proprietà che tale modello vuole evidenziare. In quanto superficie di separazione tra la molecola e l'ambiente, inoltre, essa dipende fortemente sia dalla molecola sia dall'ambiente in cui essa si trova.

