

Una riflessione sugli aspetti didattici del legame chimico come condivisione di elettroni e dell'elettronegatività

Matteo Spotti e Giovanni Di Liberto

Dipartimento di Scienza dei Materiali dell'Università di Milano-Bicocca

e-mail: giovanni.diliberto@unimib.it

Abstract. High school chemistry courses show several challenges. It is difficult to explain highly abstract and complex topics within the limited time available, and students may struggle to grasp concepts that can appear like dogma. Topics such as atomic structure, quantum mechanics and chemical bonding require a balance of scientific accuracy and clear, accessible explanations. In this work, we focus on how some key ideas can be taught more effectively, spanning from the Bohr atomic model to the chemical bonding and the concept of electronegativity. The Bohr model represents an important step for students, as it introduces the concept of quantization in a relatively simple and intuitive way, through discrete atomic radius and energy levels. From here, the transition to the quantum model of Schrödinger helps students to understand a new way of describing objects at the atomic scale, such as electrons, no longer as particles in orbits but as entities described by wavefunctions and quantum numbers. Next, with a sufficiently straightforward understanding of the quantum nature of the atom, we will examine the reasons why chemical bonds form, referring to the works of Heitler, London and Pauling. Finally, we will discuss how chemists simplify physical complexity by defining simple descriptors such as electronegativity, focusing on the works of Pauling and Mulliken. Overall, the article emphasises the importance of effective teaching strategies in chemistry, encouraging teachers to use models as helpful tools for guiding understanding rather than presenting them as absolute and rigid truths.

Keywords: elettronegatività; legame chimico; modello atomico

1. Introduzione: l'atomo di Bohr e l'atomo quantistico

Il primo modello atomico in grado di restituire una descrizione quantitativa della natura quantistica di atomi (idrogenoidi) è il modello di Bohr [1]. Questo modello atomico è forse, dal nostro personale punto di vista, quello più importante da trasmettere ai giovani studiosi in chimica, in quanto rappresenta un nodo concettuale che sancisce il passaggio dalla natura classica di atomi e particelle subatomiche a quella quantistica.

Ricordiamo che il modello di Bohr dà una descrizione classica dell'orbita circolare di un elettrone attorno al nucleo, in cui viene postulato che *i)* l'elettrone è stabile nella sua orbita, che chiamiamo stato stazionario, *ii)* il momento angolare dell'elettrone orbitante è quantizzato. Ripercorriamo rapidamente i passaggi matematici di questo modello. Dal primo postulato si evince che lungo l'orbita circolare la forza centripeta dell'elettrone deve uguagliare la forza di attrazione Coulombiana:

$$\frac{mv^2}{r} = k \frac{Ze^2}{r^2} \quad (1)$$

dove m è la massa dell'elettrone, v è la velocità lineare, r è il raggio dell'orbita, k è la costante di proporzionalità Coulombiana, Z è il numero atomico o numero di protoni (per H , $Z = 1$) ed e è la carica elementare dell'elettrone. Da questa equazione è facilmente ricavabile il raggio dell'orbita:

$$r = \frac{Zke^2}{mv^2} \quad (2)$$

Dal secondo postulato, è possibile identificare quali sono le orbite che soddisfano questa ulteriore condizione. In particolare, il momento angolare dell'elettrone lungo l'orbita deve essere un multiplo intero positivo della cosiddetta costante di Planck ridotta ($\hbar = h/2\pi$). Il termine n viene definito numero quantico principale.

$$mvr = n\hbar \quad (3)$$

A partire dalle equazioni 2 e 3 è possibile derivare l'espressione del raggio in funzione di n . È evidente che il raggio atomico, oltre al momento angolare, è quantizzato ed è direttamente proporzionale al quadrato del numero quantico principale:

$$r = n^2 \frac{\hbar^2}{kZe^2m} = n^2 a_0 \quad (4)$$

Si definisce a_0 il raggio di Bohr, uguale a r per $n = 1$. Anche l'energia del sistema risulta quantizzata, come mostrato calcolando la somma dell'energia cinetica e potenziale sfruttando le equazioni 1 e 4:

$$E = -\frac{mk^2Z^2e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{n^2} = -\frac{Z^2}{n^2} \cdot E_0 \quad (5)$$

$E_0 = mk^2e^4/2\hbar^2$ è l'energia dello stato fondamentale (*ground state*), pari a $-13,60$ eV. Una rappresentazione della quantizzazione del raggio e dell'energia è riportata in figura 1. È interessante osservare come la differenza di energia tra due livelli energetici successivi diminuisca all'aumentare del numero quantico. Quando n assume valori grandi la separazione tra i livelli energetici è quasi nulla, portando alla perdita della discretizzazione dell'energia. Questa struttura dei livelli energetici ha consentito di spiegare teoricamente le osservazioni spettroscopiche dell'atomo di idrogeno, come le serie di Balmer e di Lyman [2, 3]. Il modello di Bohr è, quindi, un modello classico con un postulato quantistico che porta a proprietà discrete, cioè quantizzate. Questo è un elemento didatticamente essenziale da trasmettere e far interiorizzare agli studenti.

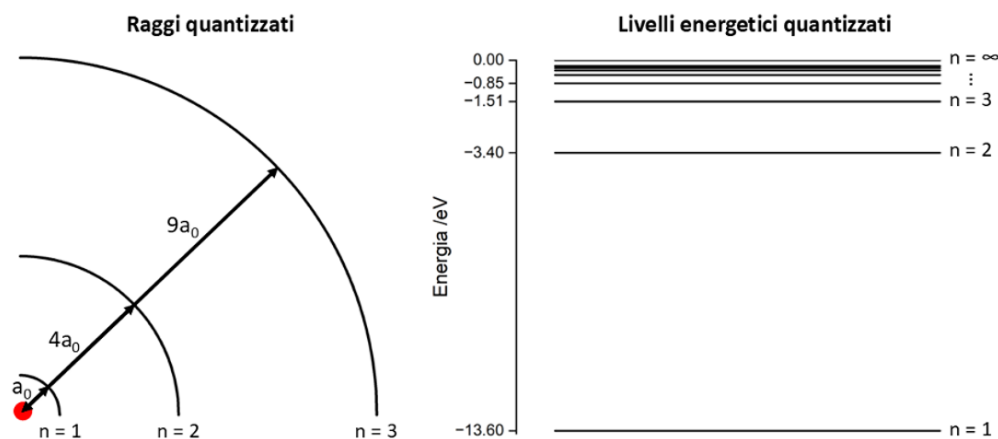


Figura 1. Rappresentazione della quantizzazione del raggio (equazione 4) e dell'energia (equazione 5) nel modello atomico di Bohr

Sappiamo che il modello quantistico di Schrödinger sancisce un cambio di pensiero, dove abbandoniamo la visione classica delle particelle, in cui possiamo assegnare delle traiettorie, e passiamo a una visione ondulatoria [4]. Riassumendo il risultato in maniera estremamente, troppo, pragmatica: nel modello di Bohr le orbite, discrete, sono descritte da un unico numero quantico n . Nel modello quantistico, invece, gli orbitali sono descritti da quattro numeri quantici, n, l, m, m_s .

Il parametro n , come già detto, è il numero quantico principale, l è il numero quantico secondario (o di momento angolare), m è il numero quantico magnetico, e m_s è il numero quantico di spin. Ognuno di questi quattro parametri descrive un differente tipo di quantizzazione. Tra tutti, m_s è quello più misterioso. Per gli elettroni può assumere solo due valori, $-1/2$ e $+1/2$. Generalmente, viene associato alla rotazione degli elettroni attorno al proprio asse; nulla di più lontano dalla realtà, infatti non c'è alcuna relazione tra m_s e la rotazione. Al contrario, m_s è un indice che possiamo assegnare a una qualunque particella subatomica e, nel caso dei fermioni (come gli elettroni), può assumere solo due valori. Altre particelle, come i bosoni, possono avere altri valori di spin ammessi. Lo spin è intimamente legato alla simmetria delle particelle e alla loro indistinguibilità, un concetto di cui diremo qualcosa in più a breve. L'esistenza di quattro numeri quantici, ognuno con il suo significato fisico, porta alla costruzione dello schema di orbitali atomici, che poi consente la costruzione delle configurazioni elettroniche degli atomi.

2. Dagli atomi alle molecole: il legame chimico

Se vogliamo descrivere la distribuzione degli elettroni in una molecola, tecnicamente, dobbiamo risolvere un problema matematico molto più complesso rispetto a quello visto per un singolo atomo. Se, invece, ragioniamo qualitativamente possiamo descrivere la configurazione elettronica di una molecola come una combinazione (lineare) delle configurazioni elettroniche associate ai singoli atomi. Questo concetto è alla base delle teorie del legame di valenza e degli orbitali molecolari [5].

Se eseguiamo la sovrapposizione delle funzioni matematiche associate agli orbitali di atomi diversi, che in gergo tecnico viene chiamata *overlap*, otterremo una nuova funzione che descriverà la distribuzione degli elettroni nella molecola. L'interpretazione fisica di questa operazione è l'interazione tra due o più elettroni associati agli orbitali che si sovrappongono. In altre parole, stiamo sovrapponendo orbitali atomici tramite la condivisione degli elettroni tra gli atomi. Definiamo, quindi, legame chimico la condivisione di elettroni tra atomi nel formare una molecola. Una condizione essenziale che definisce il legame chimico è quella di portare a uno stato più stabile. È chiaro, però, che rompere una serie di legami per formarne di nuovi, una perifrasi di reazione chimica, può portare a situazioni meno stabili; ma la formazione di un singolo legame deve stabilizzare il sistema.

Il legame come condivisione di elettroni incontra un piccolo ostacolo concettuale quando definiamo un legame chimico come covalente puro o ionico. Nel primo caso, spesso diciamo che c'è condivisione ugualitaria degli elettroni tra i due atomi coinvolti. Nel secondo caso, non c'è proprio condivisione, bensì un elettrone di un atomo viene strappato dall'altro, portando a due ioni con cariche opposte interagenti. In assenza di una vera e propria condivisione, possiamo ancora definire "legame" il legame ionico? L'idea che consente di riconciliare l'apparente discrepanza è la polarità del legame covalente, dove definiamo un concetto intermedio tra i due estremi. Se un atomo è in grado di attrarre elettroni più dell'altro, allora gli elettroni del legame saranno maggiormente localizzati su di esso. In caso di polarità nulla, ritroviamo il legame covalente puro, mentre nell'altro estremo, quello ionico, la polarità è talmente elevata che un elettrone di un atomo viene completamente strappato all'altro.

Se analizziamo più nel profondo la natura del legame chimico troviamo un dettaglio davvero affascinante, proposto per la prima volta da Heitler e London, quasi un secolo fa, nel 1927 [6]. Essi analizzarono il legame chimico nella molecola di H_2 . Per prima cosa, provarono a descrivere il legame chimico come condivisione classica di elettroni, cioè dove i nuclei di idrogeno e gli elettroni subiscono un potenziale elettrostatico definito dalla legge di Coulomb (E_{11}). La soluzione risultante è riportata in figura 2, dove è mostrato l'andamento dell'interazione H-H, cioè l'energia di legame (D_{H_2}) rispetto alla distanza H-H, d_{H-H} .

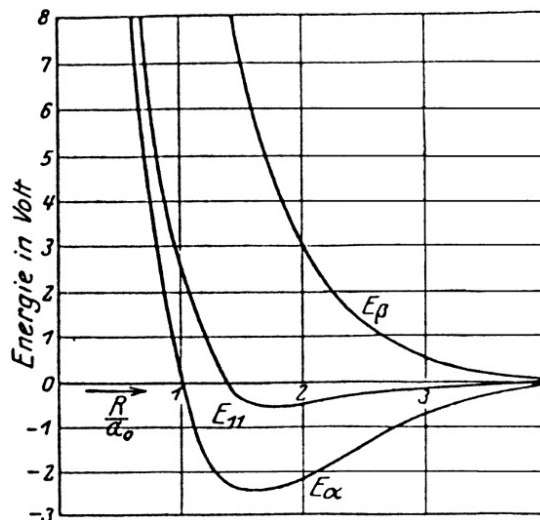


Figura 2. Profilo di energia del modello di Heitler e London di H_2 ; E_{11} rappresenta la curva calcolata considerando il legame chimico solo come interazione Coulombiana; E_α è la curva calcolata includendo anche il termine quantistico di scambio (riproduzione da ref. 6)

È curioso notare che l'interazione risultante è molto più debole (cioè, il minimo della curva ha energia poco negativa) rispetto a quella misurata sperimentalmente per il legame H-H, e non sorprende che la distanza di legame ottenuta sia più lunga. Per riprodurre le osservazioni sperimentali, Heitler e London osservarono che è necessario introdurre un concetto ulteriore. Gli elettroni devono essere necessariamente trattati come oggetti quantistici, cioè descritti da una funzione d'onda. In particolare, una proprietà degli elettroni (e in generale di tutti i fermioni) come oggetti quantistici è che sono particelle indistinguibili. Immaginiamo, ad esempio, di prendere due palline da ping-pong: entrambe arancioni, della stessa dimensione e con identico peso. Se le mescolassimo a occhi chiusi, una volta riaperti non saremmo più in grado di distinguerle tra loro: ecco, per gli elettroni vale lo stesso. Matematicamente, il sistema premescolato è definito da una certa funzione d'onda Ψ , mentre dopo il mescolamento la funzione d'onda che descriverà il sistema avrà segno opposto ($-\Psi$), se le particelle sono state scambiate. Il lettore di fronte a questa frase potrebbe essere un po' spaesato. È bene ricordare che l'interpretazione quantistica non sempre (anzi, quasi mai) ha equivalenti nella fisica classica. Non dobbiamo sorprenderci, quindi, se alcune cose risultano alquanto "misteriose" ai nostri occhi, abituati a vivere nella quotidianità della fisica classica. Possiamo riassumere facilmente questo concetto dicendo che, quantisticamente, il contributo al legame chimico è dato da un termine elettrostatico classico, più un termine puramente quantistico in cui l'interazione ha segno opposto, cioè attrattiva! Il secondo termine, viene chiamato scambio, oppure risonanza quantistica, e porta al rafforzamento dell'interazione tra gli elettroni, con conseguente diminuzione della distanza di legame, vedi figura 2, fino a descrivere un comportamento vicino a quello sperimentale (E_α).

Il lavoro di Heitler e London dimostra che il legame chimico non è condivisione classica di elettroni, o almeno, non è solo questo. Esso non ha una semplice accezione classica legata al "mettere in comune" gli elettroni, ma ha anche un contributo legato alla possibilità di scambiare gli elettroni tra i due atomi! In altre parole, il legame chimico è quantistico, quindi le molecole sono quantistiche; di conseguenza, cosa non è quantistico?

3. Il concetto di elettronegatività: dietro la natura del legame chimico

Abbiamo definito il legame chimico come l'interazione tra due atomi che condividono una coppia di elettroni. Il concetto di condivisione di elettroni del livello energetico più esterno è stato formulato

più di un secolo fa e viene attribuito a Lewis [7], di cui oggi ricordiamo il formalismo per schematizzare gli elettroni del livello energetico esterno in un atomo e i criteri per determinare la distribuzione degli elettroni in una molecola.

Linus Pauling, che iniziò la sua carriera come cristallografo, usò i principi e le prime derivazioni della meccanica quantistica per formulare la sua *teoria del legame chimico*, che è arrivata in eredità fino ai giorni nostri. Come abbiamo visto in precedenza, è fondamentale tenere a mente che il legame chimico può essere spiegato solo invocando un termine attrattivo di interazione tra due elettroni determinato dal loro scambio, un termine puramente quantistico. In altre parole, *in una molecola AB, l'elettrone dell'atomo A può appartenere a B, e quello dell'atomo B può appartenere ad A*; questo è il significato che dobbiamo attribuire alla condivisione in un legame chimico [8].

Oggi, la descrizione qualitativa, ma forse qualcosa anche in direzione quantitativa, è attribuibile in maniera semplice e immediata al concetto di elettronegatività sviluppato da Pauling in uno, il quarto, dei lavori pionieristici della formulazione della *teoria del legame chimico* [9]. Se vogliamo definire la natura del legame tra due atomi, covalente o ionico, è sufficiente calcolare la loro differenza di elettronegatività riportata nella tavola periodica.

Guardiamo un attimo il problema dal punto di vista opposto e facciamo una piccola digressione. Immaginiamo di dover descrivere teoricamente un legame chimico. Dobbiamo prendere due atomi, ognuno con il proprio numero atomico Z e il proprio numero di elettroni. Dobbiamo risolvere l'equazione di Schrödinger e determinare le soluzioni che descrivono gli orbitali nella molecola, ma non è possibile risolverla esattamente perché le interazioni tra più elettroni rendono il problema troppo complesso e non separabile matematicamente. Dovremo, allora, invocare dei metodi numerici approssimati. A seguire dobbiamo calcolare la densità elettronica, che descrive com'è distribuita nello spazio la probabilità di trovare gli elettroni. Fissando un certo valore di probabilità, è possibile rappresentare graficamente le regioni di spazio in cui è più probabile osservare gli elettroni. In questo modo riusciremo a visualizzare quanto gli elettroni più esterni preferiranno un atomo piuttosto che un altro. Se al posto di prendere la molecola AB volessimo studiare la molecola AC , dovremmo ricominciare totalmente da zero. Il problema è immensamente difficile! Come è possibile, utilizzando semplicemente due numeri riportati nella tavola periodica, aggirare questa complessità? Se vogliamo andare di male in peggio, i valori di elettronegatività degli atomi non sono oggetti misurabili, cioè, sono numeri che hanno senso solo se confrontati tra di loro. Tecnicamente, diremo che l'elettronegatività non è un'osservabile quantomeccanica. Di seguito, cercheremo di unire i frammenti del puzzle, provando a chiudere il cerchio. Va sottolineato che, quando viene introdotto un descrittore, esso può certamente risultare utile, ma rappresenta al contempo una forte semplificazione. Per questo motivo, non va considerato come una regola assoluta, bensì come un criterio razionale di massima, valido nella stragrande maggioranza dei casi, soprattutto a fini qualitativi. Rimane, in ogni caso, un criterio orientativo e non una legge rigida. Oltreoceano esiste un detto perfetto per queste situazioni, *there is no free lunch!* Questa considerazione ha valenza in tutto il mondo scientifico, ma a maggior ragione in chimica, dove spesso, anzi spessissimo, ci avvaliamo di criteri descrittivi razionali e semplici per descrivere un fenomeno mostruosamente complesso. Spesso questi criteri, che non sono regole, prendono proprio il nome di regole; regola dell'ottetto, regola di Markovnikov, regole di selezione. Difatti, puntualmente, troviamo eccezioni alla regola dell'ottetto e, quindi, invociamo un'altra regola, il diciottetto! Oppure, abbiamo reazioni che seguono la regola di anti-Markovnikov, opposta a quella di prima; ed evidentemente, avremo eccitazioni nei sistemi molecolari, che violano le regole di selezione. Nonostante tutto questo, la ricerca di regole semplici, addirittura semplificate, per spiegare concetti estremamente complessi rimane la caratteristica più meravigliosa nelle scienze chimiche. Basta ricordare che si tratta di criteri e non di regole e soprattutto che *there is no free lunch*.

Cominciamo dall'analizzare l'origine del concetto di elettronegatività. Pauling osservò che, sperimentalmente, l'energia di legame di $A-B$ (D_{AB}) nella molecola AB è sempre maggiore della media di $A-A$ (D_{AA}) e $B-B$ (D_{BB}). Se ragioniamo in termini di legame come condivisione spaziale di elettroni tra due atomi, i conti non tornano. Gli elettroni occupano porzioni di spazio definite dagli orbitali (o meglio,

dal loro modulo al quadrato) e la loro condivisione sarà definita dalla sovrapposizione spaziale dei loro orbitali, che però sarà massima sovrapponendo oggetti della stessa forma e dimensione. Quindi, (D_{AB}) non può essere maggiore di D_{AA} e D_{BB} . Chiamiamo il termine di guadagno di energia di legame Δ :

$$\Delta = D_{AB} - \frac{D_{AA} + D_{BB}}{2} \quad (6)$$

Pauling ipotizzò che dipendesse da un oggetto (Δ_χ) che descrive la preferenza dell'elettrone a rimanere più vicino a uno dei due atomi della coppia. Più è positivo Δ_χ , più forte è il termine di stabilizzazione. In particolare, se abbiamo un dipolo, costituito da due cariche $+q$ e $-q$ a distanza r , l'energia di Coulomb varia come q^2 . Analogamente, possiamo assumere $\Delta = \Delta_\chi^2$. Facciamo un esempio numerico riferito alla molecola di HCl:

$$D_{HH} = 436 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$D_{ClCl} = 243 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$D_{HCl} = 431 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$$

$$\Delta = \left(431 - \frac{436 + 243}{2} \right) \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} = 91,5 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1} \approx 0,95 \text{ eV}$$

$$\Delta = \Delta_\chi^2 = (\chi_{Cl} - \chi_H)^2$$

$$\Delta_\chi^2 = 0,97$$

L'uso delle energie di legame sperimentali permette di determinare diversi Δ_χ , ma non è possibile ottenere valori assoluti di X di singoli atomi. Indica la tendenza degli atomi ad attrarre elettroni di altri atomi ed è quella che definiamo elettronegatività. Impostando arbitrariamente $\chi_H = 2,1$, possiamo calcolare quella di tutti gli altri atomi. Per esempio:

$$\chi_{Cl} = 2,1 + 0,97 = 3,1$$

È incredibile che la scala di elettronegatività degli atomi determinata da Pauling quasi un secolo fa, a partire dalle energie di legame di una serie di composti noti, venga utilizzata tutt'oggi.

Rimane da comprendere l'origine del termine Δ che stabilizza un legame chimico eteronucleare. Pauling definì l'energia di un legame chimico come la somma di un termine di interazione puramente covalente α e uno ionico β ($\alpha + \beta = 1$). Ovvero, per molecole eteronucleari A-B, esiste un termine extra che stabilizza la molecola, correlato alla "ionicità" del legame, ovvero la molecola è in qualche modo simile a A^+B^- o A^-B^+ . Il termine ionico può essere ottenuto dai valori sperimentali del momento di dipolo μ_{exp} , dove il momento di dipolo teorico coincide con la carica che gli atomi assumerebbero se cedessero o acquistassero gli elettroni di legame, moltiplicata per la distanza di legame misurata sperimentalmente:

$$\beta = \frac{\mu}{\mu_{exp}} \quad (7)$$

Facciamo un esempio. Il momento di dipolo sperimentale di HF è 1,83 D (l'unità di misura del momento di dipolo usata frequentemente in chimica è il Debye, che non fa parte né del Sistema Internazionale né del sistema CGS). Se calcoliamo il momento di dipolo teorico di HF a partire dalla distanza sperimentale e dalle "cariche ideali", +1 e -1, otteniamo un valore molto più elevato, pari a 4,39 D. Naturalmente, il momento di dipolo reale è più piccolo di quello ideale, poiché le molecole non sono specie perfettamente ioniche. In alternativa, possiamo comprendere questo risultato considerando

che la carica reale degli atomi sarà compresa tra 0 (legame perfettamente covalente) e 1 (o -1) (legame perfettamente ionico). Sulla base di questi valori, $\beta = 0,42$, ovvero 42% in percentuale. Possiamo ora discutere come il concetto di elettronegatività entri nel discorso. Se grafichiamo β rispetto alla differenza di elettronegatività, il valore sarà sempre $0\% < \beta < 100\%$. Maggiore è $\Delta\chi$, maggiore sarà β . L'andamento dei punti "sperimentali" può essere razionalizzato semi quantitativamente con una funzione sigmoidale proposta da Pauling, del tipo:

$$\beta = 1 - e^{-\frac{\Delta\chi^2}{4}} \quad (8)$$

Se osserviamo più attentamente l'andamento, riconosciamo tre zone (Figura 3).

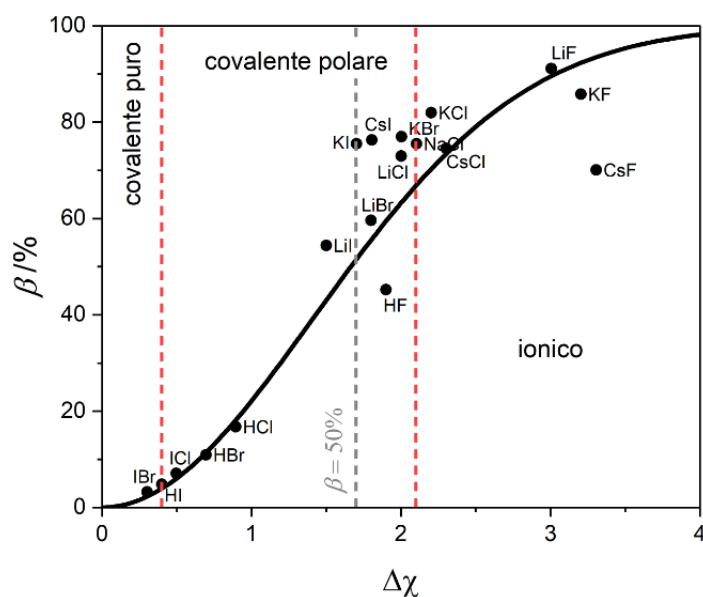


Figura 3. Curva che mette in relazione il grado di carattere ionico di un legame (β) con la differenza di elettronegatività di Pauling degli atomi ($\Delta\chi$); i punti sperimentali sono basati sui valori osservati del momento di dipolo elettrico delle molecole biatomiche [10]

Nella prima non c'è alcun contributo ionico al legame, cioè il legame è solo covalente (puro), se $0 < \Delta\chi < 0,4$. Ecco il criterio che definisce quando un legame è covalente puro.

Per valori di $0,5 < \Delta\chi < 2,0$ c'è un andamento pressoché lineare del contributo ionico al legame chimico con la differenza di elettronegatività. Ecco che appare evidente come al crescere di $\Delta\chi$ ci sia una tendenza crescente di un atomo ad attrarre gli elettroni dell'altro, aumentando la polarità del legame covalente.

Infine, per $\Delta\chi > 2,1$, il carattere ionico inizia a convergere e si avvicina al 100%: ecco che, una volta che un atomo riesce a strappare l'elettrone all'altro, il legame diventa ionico, indipendentemente da quanto sia positiva la differenza di elettronegatività.

L'analisi del grafico, riportato in figura 3, suggerisce però che non esiste un confine netto tra legame covalente e ionico, nonostante spesso ci esercitiamo e facciamo esercitare i nostri studenti a etichettare un legame come di un tipo o dell'altro. La verità è che non esiste un confine, bensì un legame avrà sempre una doppia natura, dove un tipo di descrizione sarà dominante, legame covalente puro o ionico, oppure contribuiranno entrambi, legame covalente polare. Se il legame fosse dato da due contributi, potremmo definire ionico il legame quando $\beta > 50\%$. Se sostituiamo 0,5 nell'equazione 8, troviamo $\Delta\chi = 1,7$: ecco un criterio che viene usato per definire un legame ionico. Peccato però che, se prendiamo il caso di HF, $\Delta\chi = 1,9$, la molecola mostra un comportamento polare, non ionico. È sufficiente considerare

che si presenta in condizioni standard come un gas e non in fase solida. Questo perché un legame ionico puro si può ipotizzare solo nei solidi ionici, dove le interazioni elettrostatiche tra molti ioni nel reticolo cristallino, descritte dal potenziale di Madelung, stabilizzano efficacemente le cariche. Difatti, se guardiamo la figura 3, HF è un punto un po' fuori rispetto alla curva semplificata dell'equazione 8. Siccome praticamente nessun sistema con $1,7 < \Delta_\chi < 1,9$ segue correttamente l'andamento teorico descritto dall'equazione 8, il valore 1,7 è stato sostituito da 1,9. Siamo già a due criteri per definire la stessa cosa. Infine, è possibile osservare che sistemi ionici sono caratterizzati dall'interazione di un metallo con un non metallo. Ecco un terzo criterio; difatti, in questi casi $\Delta_\chi > 2,0$. È fondamentale, quindi, ricordare l'importanza di contestualizzare i criteri, o le regole, analizzando la loro origine e il campo di applicabilità. Non c'è peggior incentivo allo studio di un argomento se l'argomento stesso non è univoco e appare in chiaroscuro. *Se non mi ispira fiducia, se è ambiguo, perché dovrei crederci?*

Ma come è possibile che un numero, Δ_χ , che è originato da due numeri non misurabili, non definibili in assoluto, possa funzionare così bene? Bisogna aspettare una decina di anni, fino alla formulazione di un ulteriore concetto di elettronegatività, questa volta assoluta, da parte di Mulliken [11]. Egli fornì una base teorica più solida al concetto di elettronegatività. Secondo Mulliken, essa corrisponde al valore medio tra la prima energia di ionizzazione (IE) e l'affinità elettronica (EA):

$$\chi = \frac{IE+EA}{2} \quad (9)$$

Questa è una misura assoluta poiché IE ed EA sono misurabili. Da un lato il concetto di elettronegatività perde la semplice interpretabilità, ma guadagna in fondamento teorico, *there is no free lunch*. Incredibilmente, le due scale (Pauling e Mulliken) sono linearmente correlate (Figura 4):

$$\chi_{Pauling} = 0,39\chi_{Mulliken} + 0,24 \quad (10)$$

Questa linearità dimostra che l'elettronegatività di Pauling, pur non essendo una quantità formalmente osservabile in modo diretto, è strettamente legata a grandezze fisiche misurabili come quelle definite da Mulliken. Oggi, nonostante l'elettronegatività di Mulliken sia meglio fondata teoricamente, quella di Pauling è ampiamente adottata per il suo uso semplice e pratico in un ampio spettro di applicazioni chimiche.

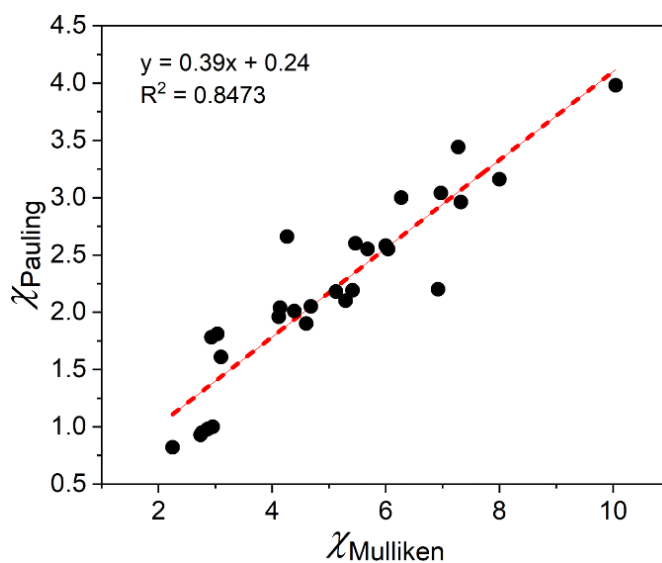


Figura 4. Relazione lineare tra l'elettronegatività definita da Pauling e da Mulliken; il grafico è stato prodotto con i dati di elettronegatività di Pauling, affinità elettronica ed energia di prima ionizzazione ricavati dalla ref. 12

4. Conclusioni

In conclusione, l'insegnamento della chimica nelle scuole superiori richiede un delicato equilibrio tra rigore teorico e semplificazione didattica. Alcuni concetti fondamentali, come la struttura atomica, il legame chimico e l'elettronegatività, sono complessi e affondano le loro radici nella meccanica quantistica, un ambito lontano dall'esperienza quotidiana e dagli strumenti concettuali, matematici e metodologici a disposizione dei discenti degli istituti superiori di secondo grado. Per questo motivo, il ruolo del docente è fondamentale per costruire un percorso che renda questi contenuti accessibili senza alterarne il significato scientifico. Il passaggio dal modello di Bohr al modello quantistico rappresenta un momento chiave, non solo dal punto di vista storico, ma soprattutto didattico, in quanto consente di guidare gli studenti da una visione più intuitiva a una più astratta e corretta della realtà atomistica. Allo stesso modo, il legame chimico e il concetto di elettronegatività mostrano come la chimica abbia reso possibile descrivere fenomeni estremamente complessi attraverso modelli e criteri semplici, a condizione che se ne conoscano i limiti.

In questa prospettiva, è fondamentale presentare le "regole" della chimica come strumenti interpretativi e non come verità assolute. Solo in tal modo è possibile favorire una comprensione più profonda e critica della disciplina, stimolando negli studenti non solo l'apprendimento, ma anche la curiosità verso la natura della chimica.

Riferimenti bibliografici

- [1] N. Bohr, I. On the constitution of atoms and molecules, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*, 1913, **26**(151), 1-25.
- [2] J. J. Balmer, Notiz über die Spectrallinien des Wasserstoffs, *Annalen der physik*, 1885, **261**(5), 80-87.
- [3] T. Lyman, The spectrum of hydrogen in the region of extremely short wave-lengths, *Astrophysical Journal*, 1906, **23**(3), 181-210.
- [4] E. Schrödinger, Quantisierung als eigenwertproblem, *Annalen der physik*, 1926, **385**(13), 437-490.
- [5] P. W. Atkins, J. De Paula, J. Keeler, *Atkins' physical chemistry*, Oxford University Press, 2023.
- [6] W. Heitler, F. London, Wechselwirkung neutraler atome und homöopolare bindung nach der quantenmechanik, *Zeitschrift für Physik*, 1927, **44**(6), 455-472.
- [7] G. N. Lewis, The atom and the molecule, *Journal of the American Chemical Society*, 1916, **38**(4), 762-785.
- [8] L. Pauling, The shared-electron chemical bond, *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 1928, **14**(4), 359-362.
- [9] L. Pauling, The nature of the chemical bond. IV. The energy of single bonds and the relative electronegativity of atoms, *Journal of the American Chemical Society*, 1932, **54**(9), 3570-3582.
- [10] Dipole moments, in *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, Internet Version 2005 (Ed. D. R. Lide) (https://archive.org/details/isbn_9780849305948), CRC Press, Boca Raton, FL, 2005.
- [11] R. S. Mulliken, A new electroaffinity scale; together with data on valence states and on valence ionization potentials and electron affinities, *The Journal of Chemical Physics*, 1934, **2**(11), 782-793.
- [12] M. Weller, et al., *Inorganic chemistry*, Oxford University Press, USA, 2014.

