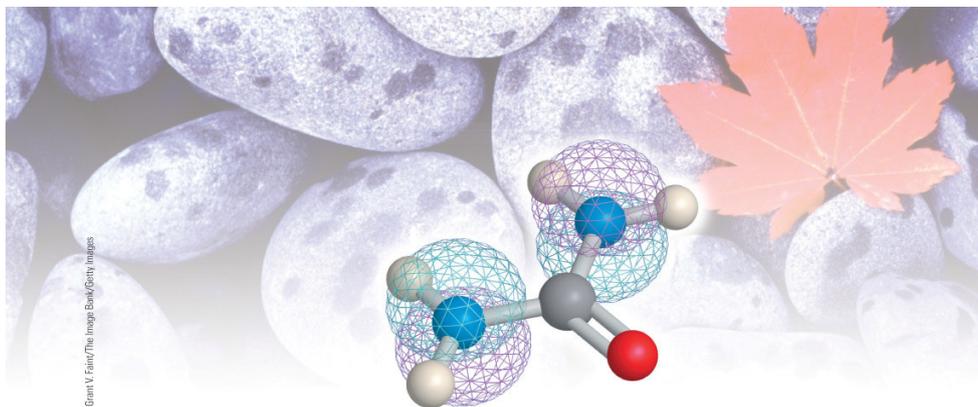




## Struttura e legame chimico



### Proprietà atomiche

Rappresentazione degli orbitali s, p e d. Gli orbitali s sono sferici, gli orbitali p hanno una forma a manubrio, e quattro dei cinque orbitali d hanno una forma a quadrifoglio. I differenti lobi degli orbitali p vengono spesso raffigurati per convenienza a forma di lacrima, ma la loro vera forma rassomiglia piuttosto ad una maniglia, come indicato nella rappresentazione generata al computer di un orbitale 2p dell'idrogeno sulla destra.



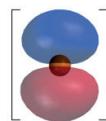
Orbitale s



Orbitale p

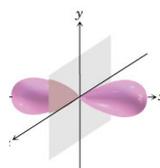
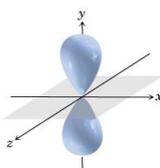
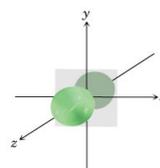


Orbitale d



Orbitale 2p

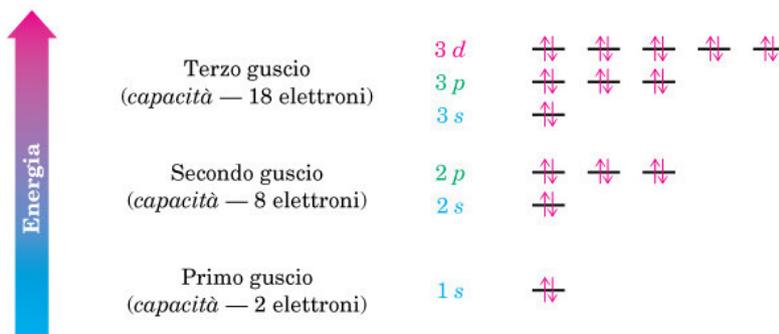
Forma degli orbitali 2p. Ciascuno dei tre orbitali a forma di manubrio ha un nodo tra i due lobi.

Orbitale 2p<sub>x</sub>Orbitale 2p<sub>y</sub>Orbitale 2p<sub>z</sub>

Orbitali 2p

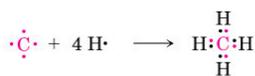
### Proprietà atomiche

Livelli energetici degli elettroni in un atomo. Il primo guscio contiene un solo orbitale 1s; il secondo guscio contiene un massimo di otto elettroni in un orbitale 2s e tre orbitali 2p; il terzo guscio contiene un massimo di diciotto elettroni in un orbitale 3s, tre orbitali 3p e cinque orbitali 3d, e così via. I due elettroni in ciascun orbitale sono rappresentati da frecce in su e in giù. Anche se non viene mostrato, il livello energetico dell'orbitale 4s cade tra il 3p ed il 3d.



### Legame chimico

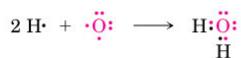
#### Il legame covalente



Metano (CH<sub>4</sub>)



Ammoniaca (NH<sub>3</sub>)



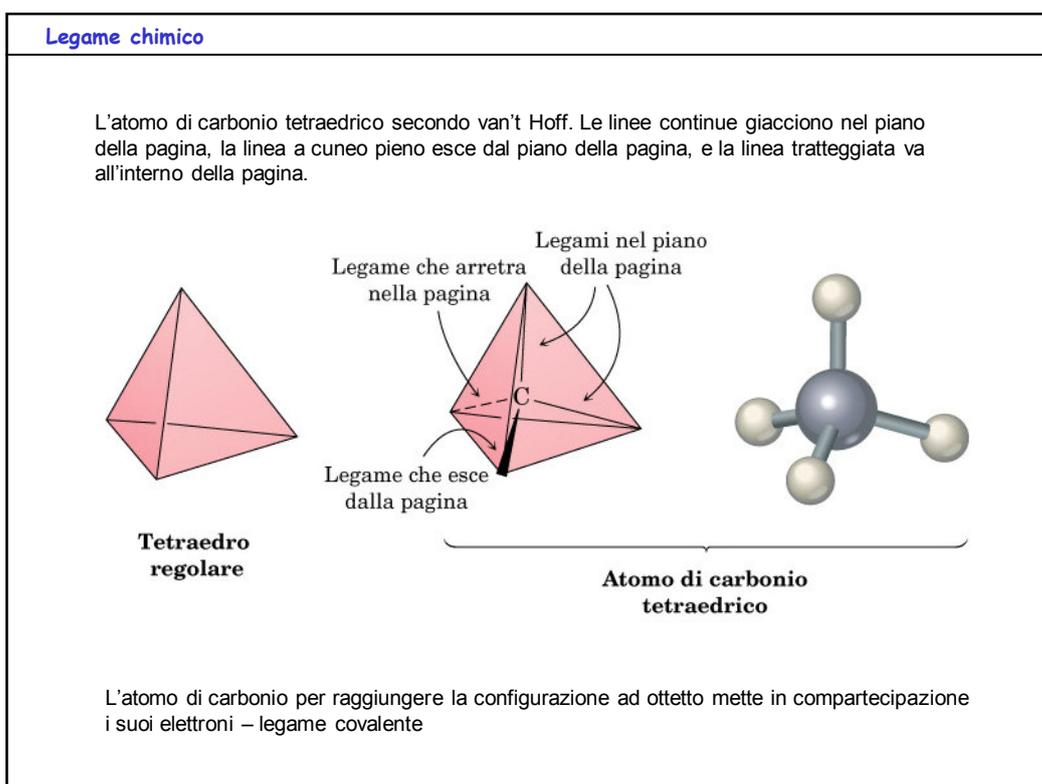
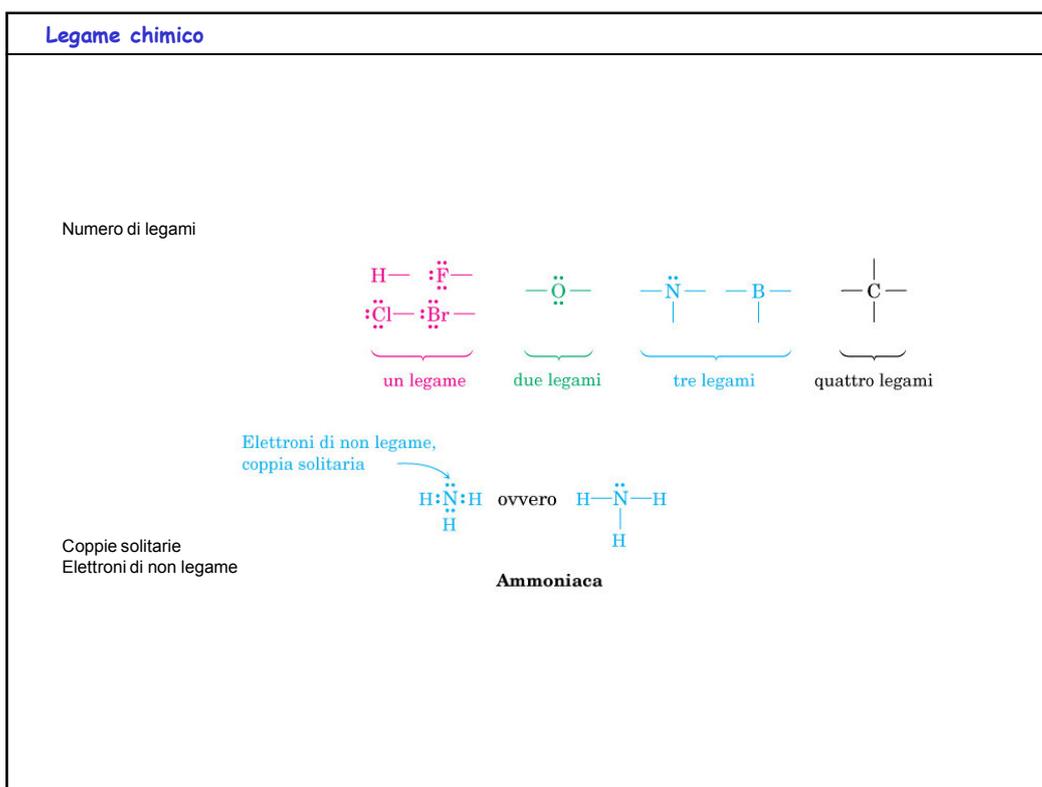
Acqua (H<sub>2</sub>O)



Metanolo (CH<sub>3</sub>OH)

#### Strutture di Lewis e Kekulé di alcune molecole semplici

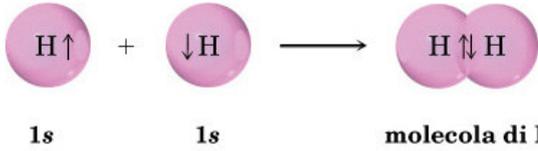
Nome	Struttura di Lewis	Struttura di Kekulé	Nome	Struttura di Lewis	Struttura di Kekulé
Acqua (H <sub>2</sub> O)	H: $\ddot{\text{O}}$ :H	H—O—H	Metano (CH <sub>4</sub> )	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}:\text{C}:\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$
Ammoniaca (NH <sub>3</sub> )	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}:\text{N}:\text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{N}-\text{H} \end{array}$	Metanolo (CH <sub>3</sub> OH)	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}:\text{C}:\ddot{\text{O}}:\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$



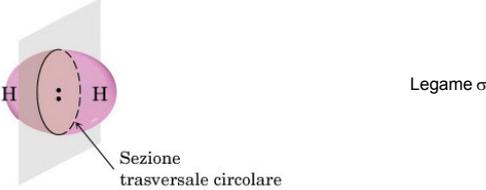
**Legame chimico**

**Teoria del legame di valenza**

Orbitali singolarmente occupati si sovrappongono.



**1s**                      **1s**                      **molecola di H<sub>2</sub>**



Legame  $\sigma$

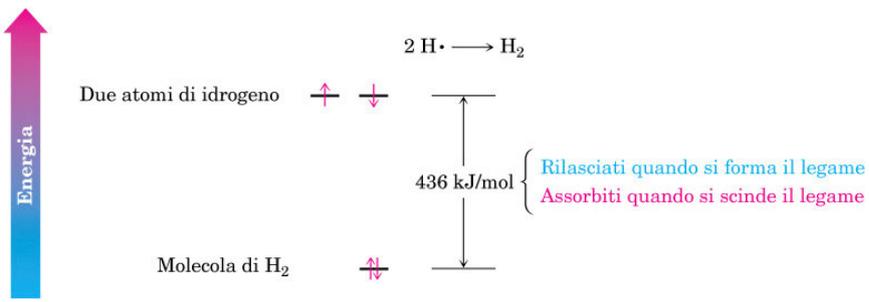
Sezione trasversale circolare

Simmetria cilindrica del legame H–H. L'intersezione di un piano che passa attraverso l'orbitale è un cerchio.

**Legame chimico**

**Energia di legame**

Livelli energetici degli atomi di H e della molecola H<sub>2</sub>. Dato che la molecola H<sub>2</sub> è più bassa in energia dei due atomi di H per 436 kJ/mol (104 kcal/mol), una energia pari a 436 kJ/mol viene rilasciata quando si forma il legame H–H. Per contro, si dovrebbero fornire 436 kJ/mol alla molecola H<sub>2</sub> per scindere il legame H–H.



$2 \text{ H}\cdot \longrightarrow \text{H}_2$

Due atomi di idrogeno     $\uparrow$     $\downarrow$

436 kJ/mol

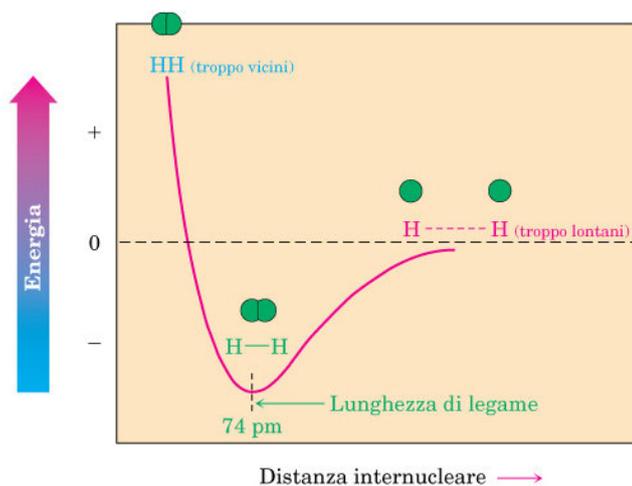
Molecola di H<sub>2</sub>     $\uparrow\downarrow$

{ Rilasciati quando si forma il legame  
 Assorbiti quando si scinde il legame

## Legame chimico

### Distanza di legame

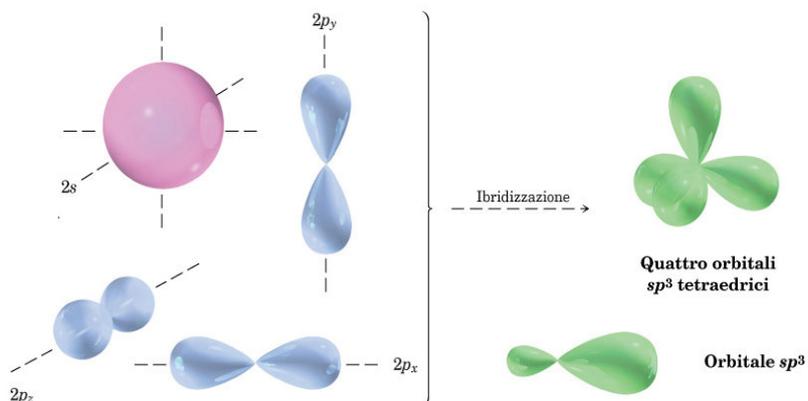
Grafico dell'energia contro la distanza internucleare per due atomi di idrogeno. La distanza tra i nuclei al punto di minima energia è la lunghezza di legame.



## Legame chimico: ibridizzazione

### Ibridizzazione

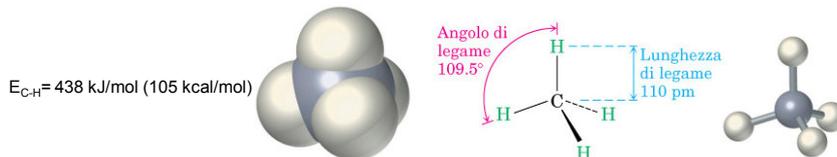
Quattro orbitali ibridi  $sp^3$  (verde), orientati verso gli angoli di un tetraedro regolare, sono formati per combinazione di un orbitale atomico s (rosso) e tre orbitali atomici p (blu). Gli ibridi  $sp^3$  sono asimmetrici rispetto al nucleo, conferendo loro una direzionalità e consentendogli di formare legami più forti quando si legano ad altri atomi.



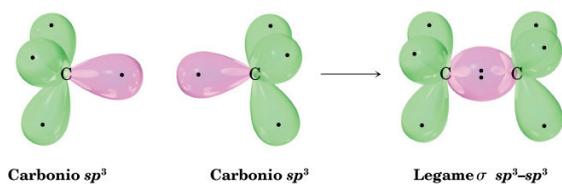
### Legame chimico: ibridizzazione

Esempi di molecole con ibridazione  $sp^3$

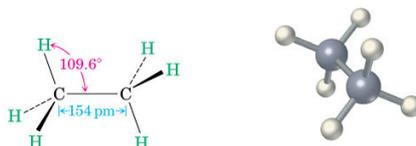
Struttura del metano che mostra gli angoli di legame di  $109.5^\circ$ .



Struttura dell'etano. Il legame carbonio-carbonio viene formato per sovrapposizione s di due orbitali ibridi  $sp^3$ . (Per chiarezza, i lobi più piccoli degli orbitali ibridi  $sp^3$  non vengono mostrati).



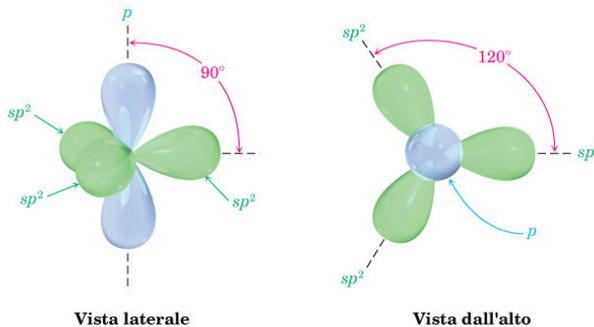
C-C 376 kJ/mol  
C-H 420 kJ/mol



### Legame chimico: ibridizzazione

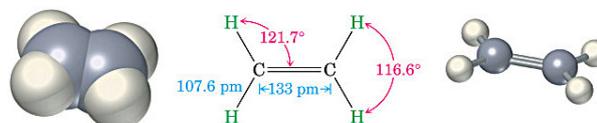
Un carbonio ibridizzato  $sp^2$ .

I tre orbitali ibridi  $sp^2$  equivalenti (verde) giacciono in un piano ad un angolo di  $120^\circ$  l'uno rispetto all'altro, ed un singolo orbitale p non ibridizzato (blu) è perpendicolare al piano  $sp^2$ .



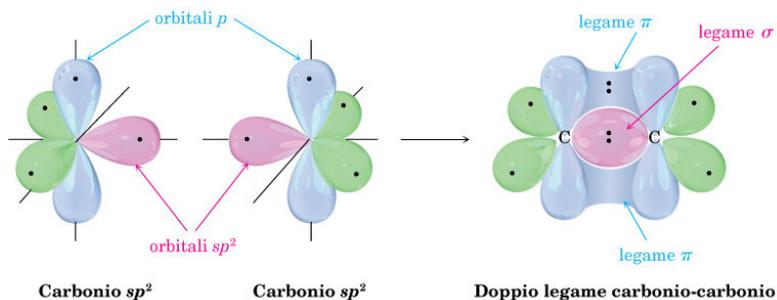
Struttura dell'etilene

C-C 611 kJ/mol  
C-H 444 kJ/mol



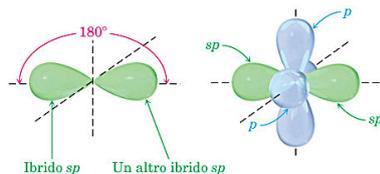
### Legame chimico: ibridizzazione

Sovrapposizione orbitalica di due atomi di carbonio ibridizzati  $sp^2$  a formare un doppio legame carbonio-carbonio. Una parte del doppio legame deriva dalla sovrapposizione  $\sigma$  (testa-testa) degli orbitali  $sp^2$  (rosso), e l'altra parte deriva dalla sovrapposizione  $\pi$  (laterale) degli orbitali  $p$  non ibridizzati (blu). Il legame  $\pi$  ha regioni di densità elettronica su ciascun lato di una linea tracciata tra i nuclei.

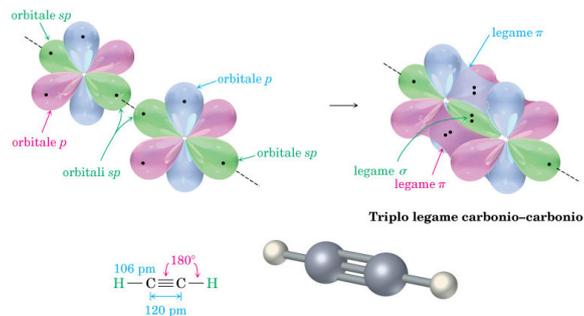


### Legame chimico: ibridizzazione

Un atomo di carbonio ibridizzato  $sp$ . I due orbitali ibridi  $sp$  (verde) sono orientati a  $180^\circ$  l'uno dall'altro, e sono perpendicolari ai due orbitali  $p$  rimanenti (blu).

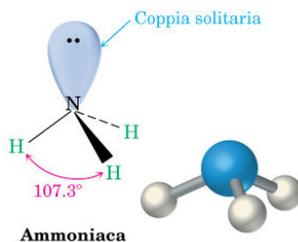


Struttura dell'acetilene. I due atomi di carbonio ibridizzati  $sp$  sono uniti da un legame  $\sigma$   $sp-sp$  e da due legami  $\pi$   $p-p$ .

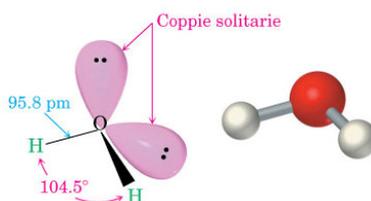


### Legame chimico: ibridizzazione

Ibridizzazione dell'azoto nell'ammoniaca. L'atomo di azoto è ibridizzato  $sp^3$ , dando angoli di legame H-N-H di  $107.3^\circ$ .

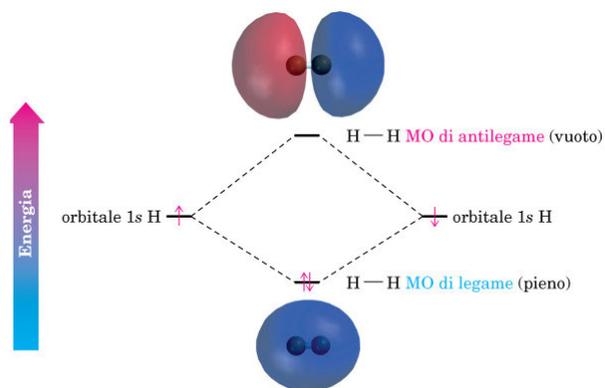


Struttura dell'acqua. L'atomo di ossigeno è ibridizzato  $sp^3$  e possiede due coppie elettroniche solitarie. L'angolo di legame H-O-H è di  $104.5^\circ$ .



### Legame chimico: orbitale molecolare

Orbitali molecolari di  $H_2$ . La combinazione dei due orbitali atomici 1s dell'idrogeno porta a due orbitali molecolari per  $H_2$ . Il MO a più bassa energia, di legame, è pieno, mentre il MO a più alta energia, di antilegame, è vuoto.



**Legame chimico: orbitale molecolare**

Descrizione tramite orbitali molecolari del legame  $\pi$  C=C nell'etilene. Il MO  $\pi$  di legame deriva dalla combinazione addittiva degli orbitali atomici ed è occupato. Il MO  $\pi$  di antilegame deriva dalla combinazione sottrattiva degli orbitali atomici ed è vuoto.

