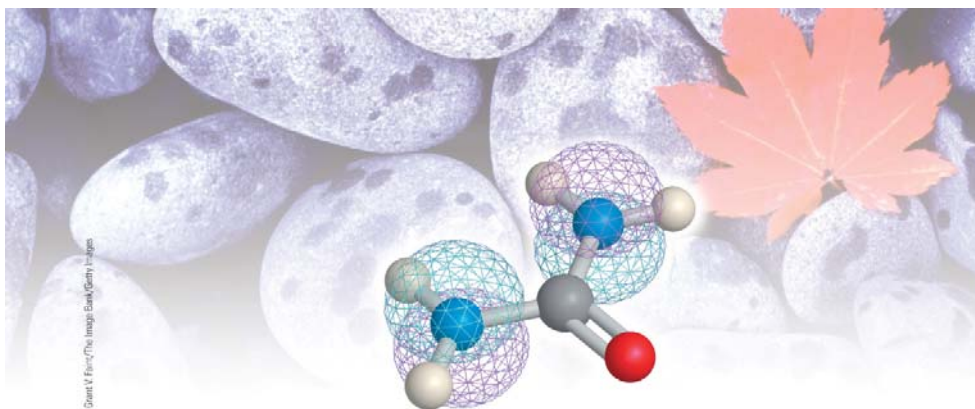


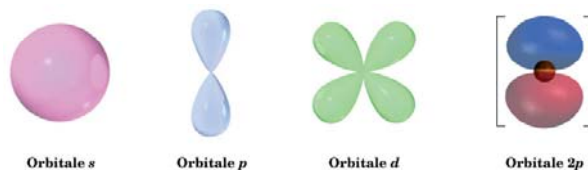


## Struttura e legame chimico

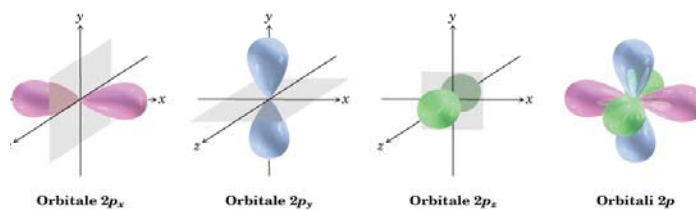


### Proprietà atomiche

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.

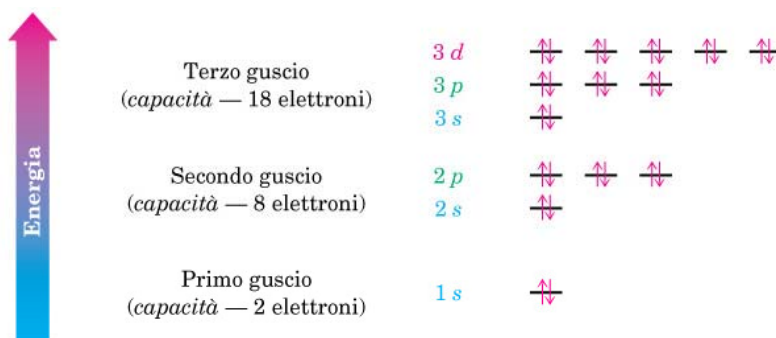


Forma degli orbitali 2p. Ciascuno dei tre orbitali a forma di manubrio ha un nodo tra i due lobi.



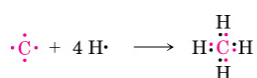
### Proprietà atomiche

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

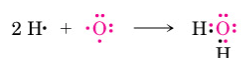
#### Il legame covalente



Metano ( $\text{CH}_4$ )



Ammoniaca ( $\text{NH}_3$ )



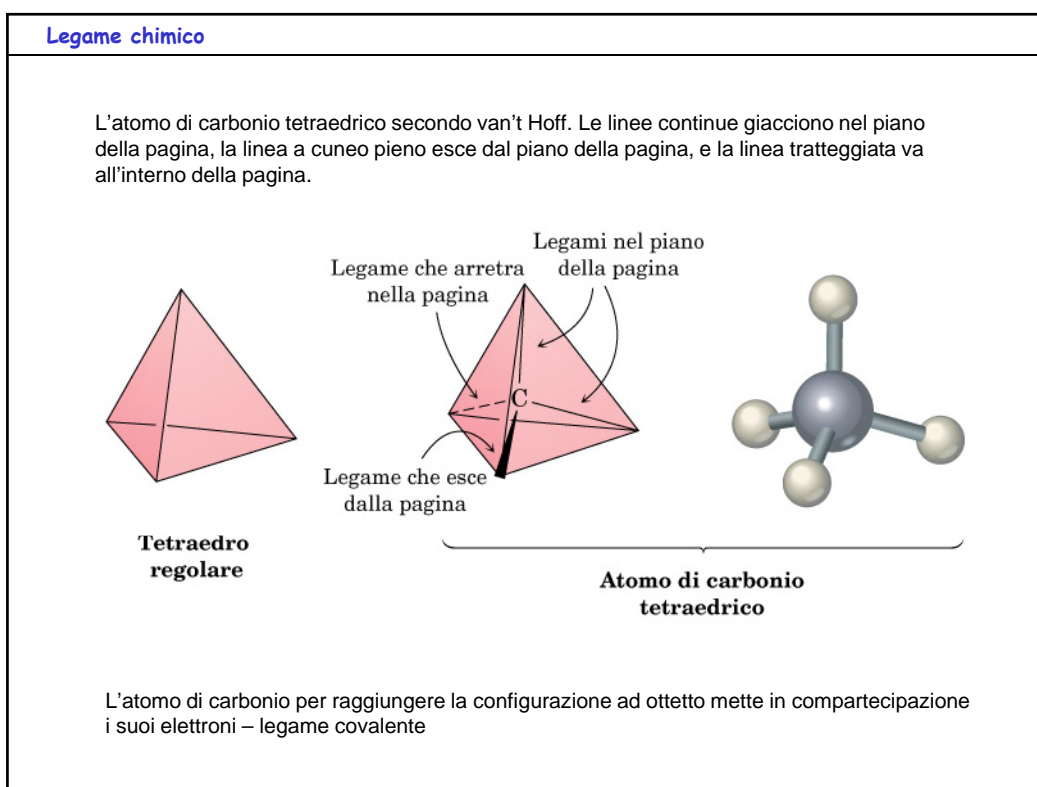
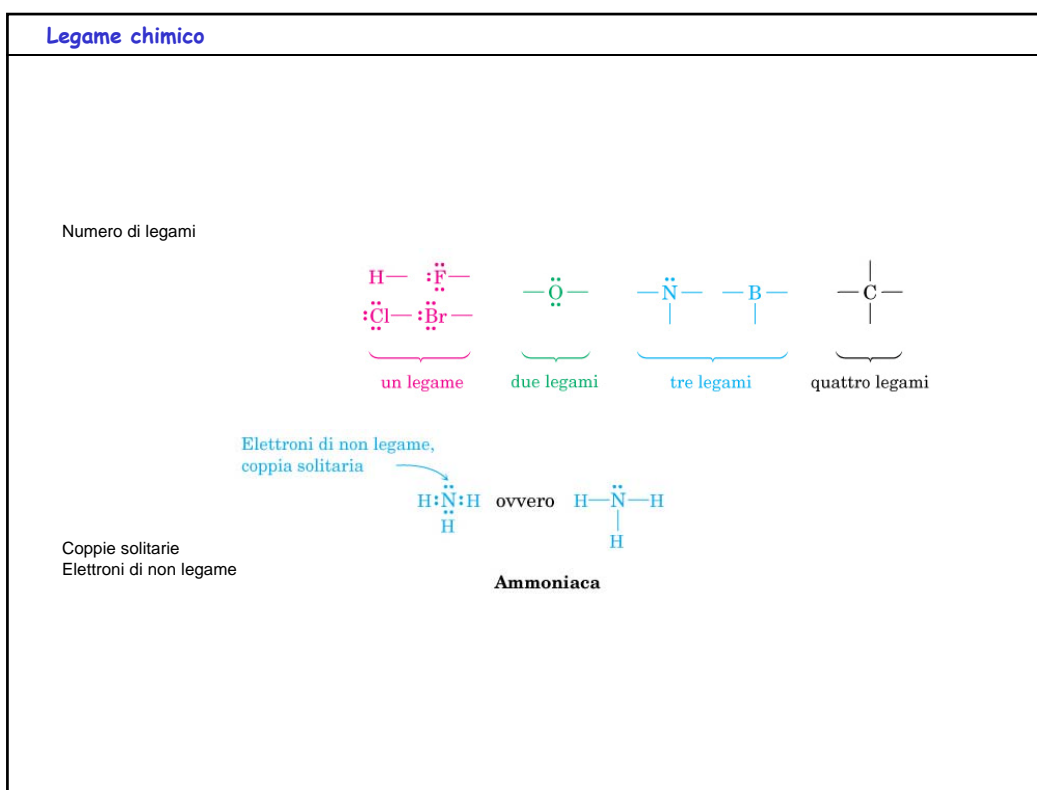
Acqua ( $\text{H}_2\text{O}$ )

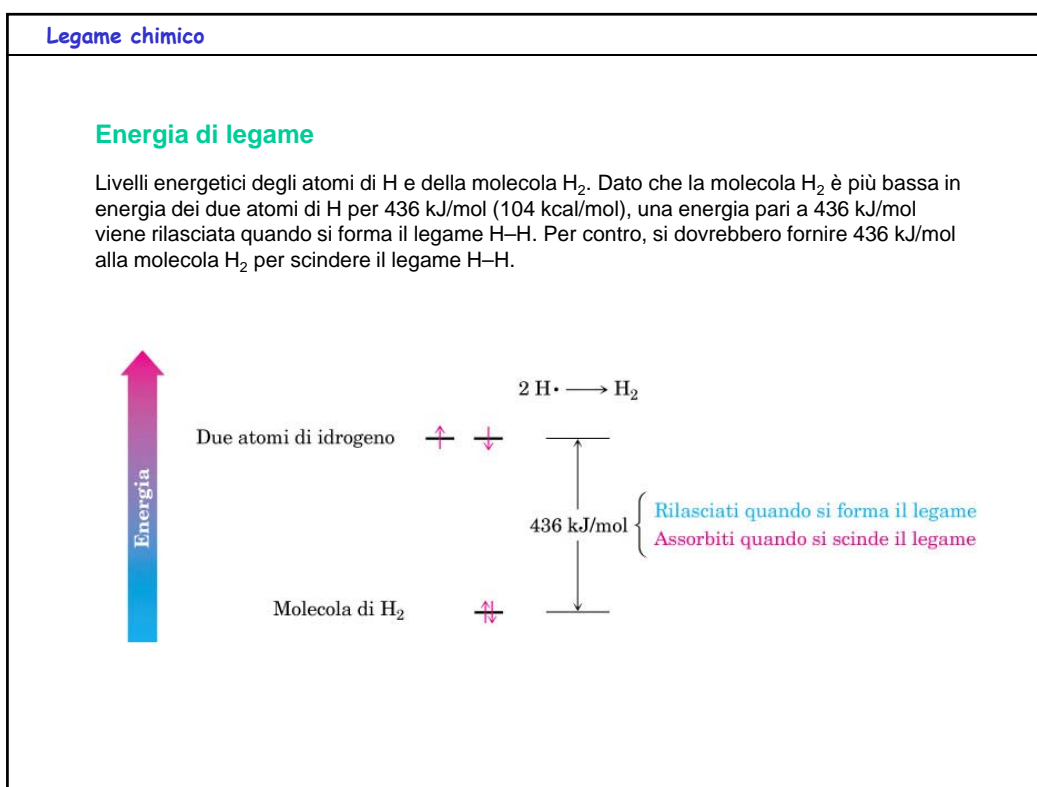
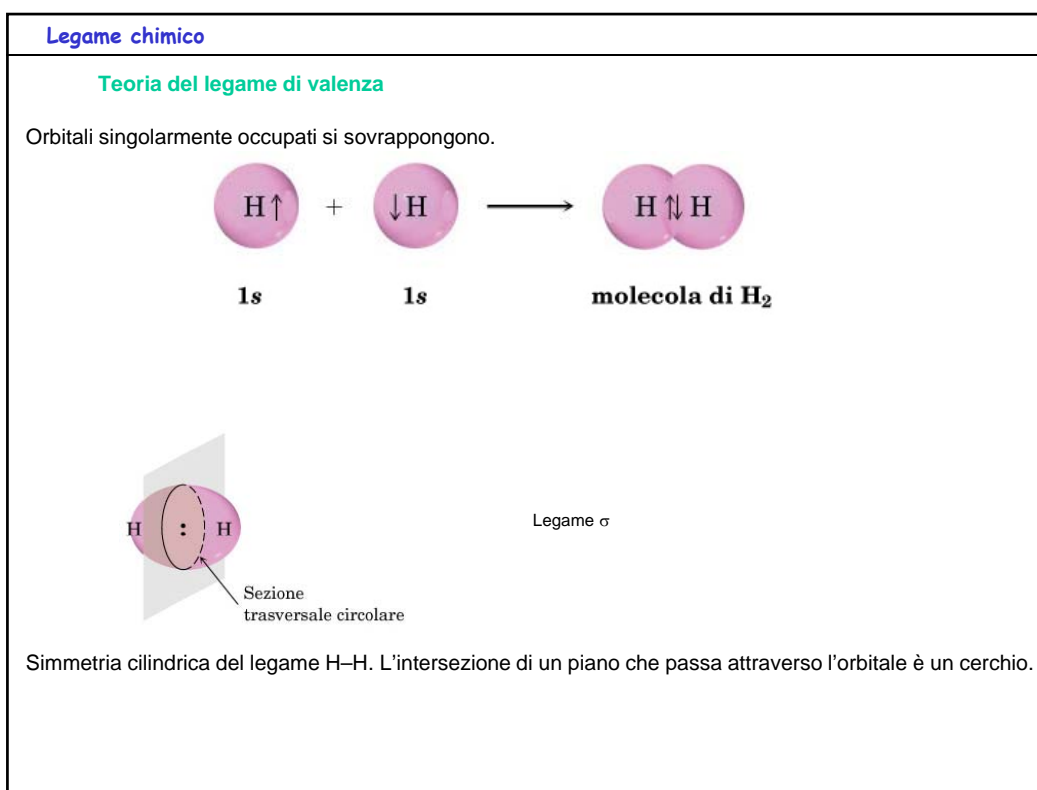


Metanolo ( $\text{CH}_3\text{OH}$ )

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

Nome	Struttura di Lewis	Struttura di Kekulé	Nome	Struttura di Lewis	Struttura di Kekulé
Acqua ( $\text{H}_2\text{O}$ )	$\text{H}:\ddot{\text{O}}:\text{H}$	$\text{H}-\text{O}-\text{H}$	Metano ( $\text{CH}_4$ )	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}:\text{C}:\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$
Ammoniaca ( $\text{NH}_3$ )	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}:\text{N}:\text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{N}-\text{H} \end{array}$	Metanolo ( $\text{CH}_3\text{OH}$ )	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}:\text{C}:\ddot{\text{O}}:\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\   \\ \text{H}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\   \\ \text{H} \end{array}$

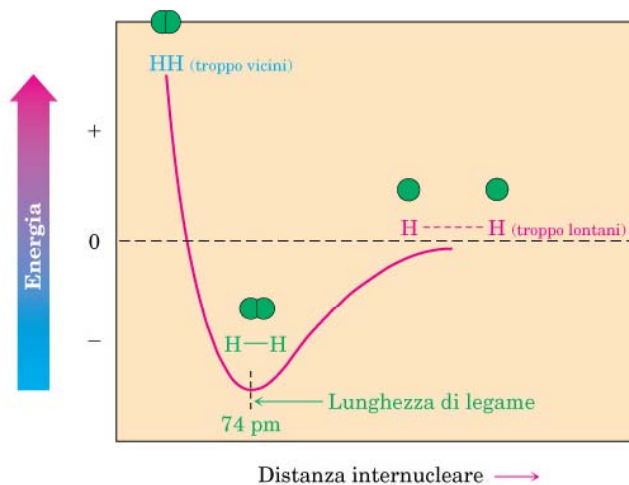




## Legame chimico

### Distanza di legame

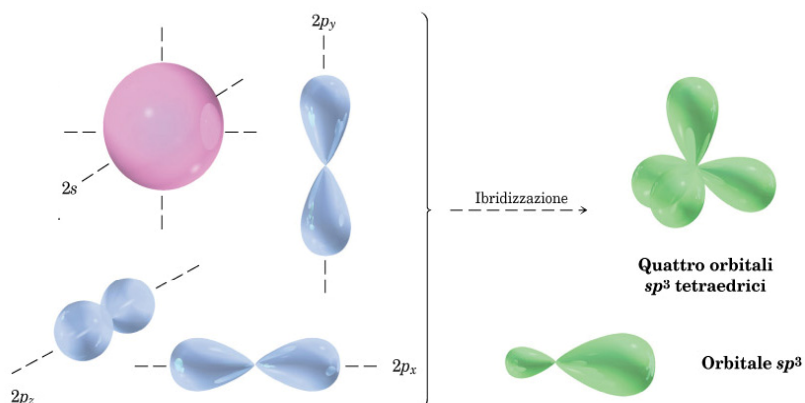
Grafico dell'energia contro la distanza internucleare per due atomi di idrogeno. La distanza tra i nuclei al punto di minima energia è la lunghezza di legame.



## Legame chimico: ibridizzazione

### Ibridizzazione

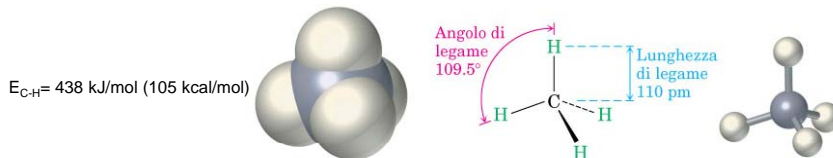
Quattro orbitali ibridi  $sp^3$  (verde), orientati verso gli angoli di un tetraedro regolare, sono formati per combinazione di un orbitale atomico s (rosso) e tre orbitali atomici p (blu). Gli ibridi  $sp^3$  sono asimmetrici rispetto al nucleo, conferendo loro una direzionalità e consentendogli di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



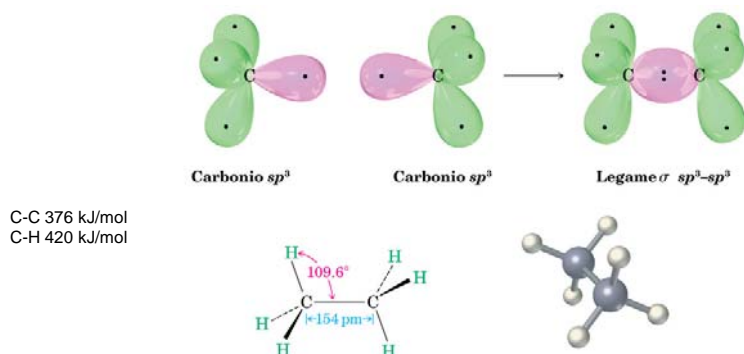
### Legame chimico: ibridizzazione

Esempi di molecole con ibridazione  $sp^3$

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



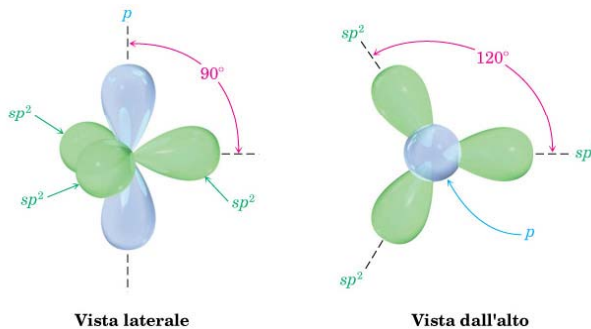
Struttura dell'etano. Il legame carbonio-carbonio viene formato per sovrapposizione s di due orbitali ibridi  $sp^3$ . (Per chiarezza, i lobi più piccoli degli orbitali ibridi  $sp^3$  non vengono mostrati).



### Legame chimico: ibridizzazione

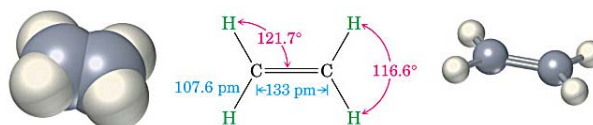
Un carbonio ibridizzato  $sp^2$ .

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  $sp^2$ .



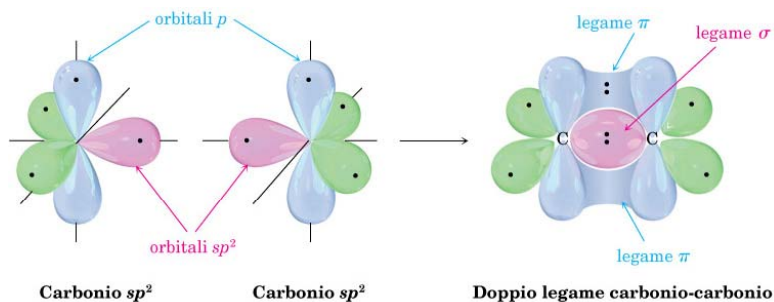
Struttura dell'etilene

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



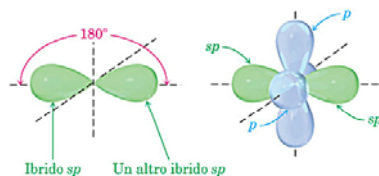
### Legame chimico: ibridizzazione

Sovrapposizione orbitale 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.

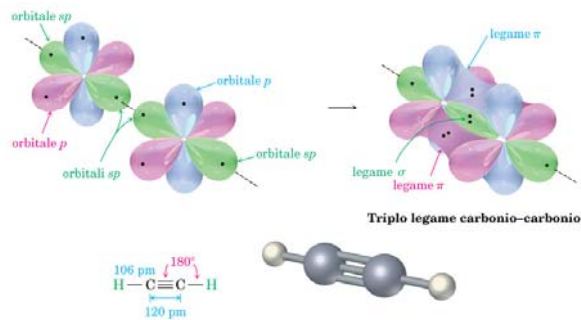


### Legame chimico: ibridizzazione

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).



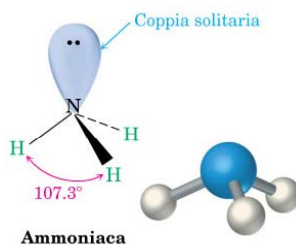
Struttura dell'acetilene. I due atomi di carbonio ibridizzati  $sp$  sono uniti da un legame  $\sigma$   $sp-sp$  e da due legami  $\pi$   $p-p$ .



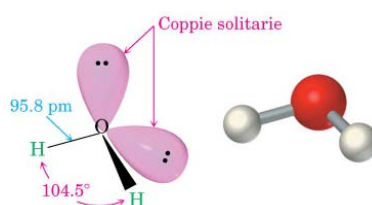


### Legame chimico: ibridizzazione

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

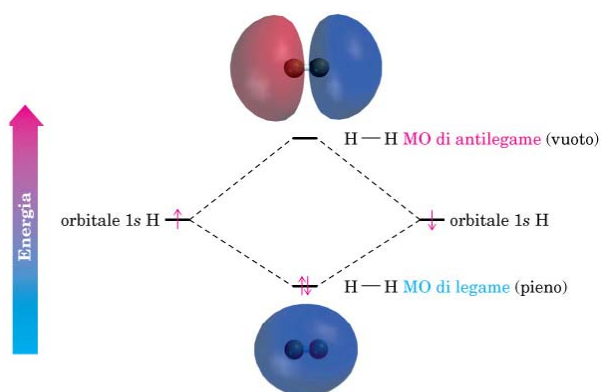


Struttura dell'acqua. L'atomo di ossigeno è ibridizzato  $sp^3$  e possiede due coppie elettroniche solitarie. L'angolo di legame H-O-H è di  $104.5^\circ$ .



### 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.

