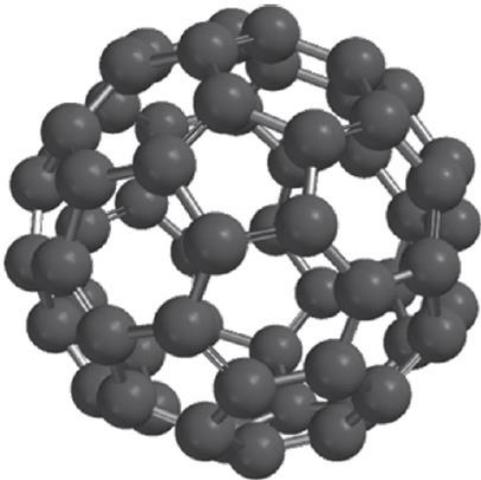


La geometria molecolare
e l'ibridazione
degli orbitali atomici



Scrivere le Strutture di Lewis

1. Scrivere la struttura di base del composto mostrando come gli atomi sono legati gli uni agli altri. Disponi al centro l'elemento meno elettronegativo.
2. Conta il numero totale di e^- di valenza. Per gli ioni poliatomici: aggiungi 1 per ogni carica negativa. Sottrai 1 per ogni carica positiva.
3. Completa l'ottetto per tutti gli atomi **tranne** che per l'idrogeno; per il raggiungimento dell'ottetto si possono usare anche elettroni non spaiati (doppietti) formando legami covalenti **dativi**.
4. Se le strutture contengono troppi elettroni formare **doppi o tripli legami** con l'atomo centrale.



Scrivi la struttura di Lewis del trifluoruro di azoto (NF₃).

Stadio 1: N è meno elettronegativo di F, metti N al centro

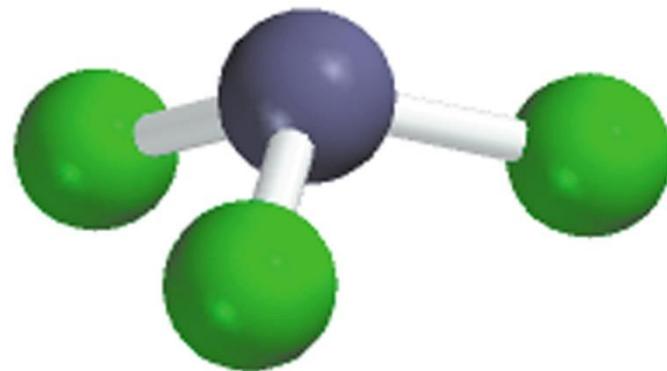
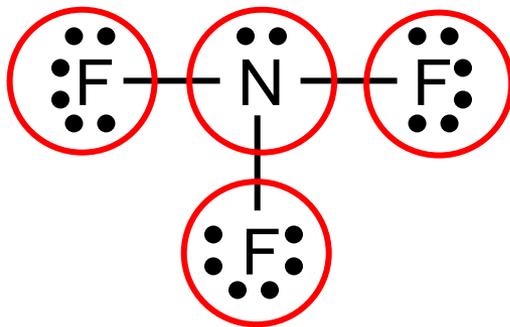
Stadio 2: Conta gli elettroni di valenza N: 5 (2s²2p³) e F: 7 (2s²2p⁵)

$$5 + (3 \times 7) = 26 \text{ elettroni di valenza}$$

Stadio 3: Disegna 3 legami singoli tra gli atomi N e F e completa gli ottetti sugli atomi N e F.

Stadio 4: Controlla, il n° degli e⁻ nella struttura è uguale al numero degli e⁻ di valenza?

$$3 \text{ legami singoli } (3 \times 2) + 10 \text{ coppie solitarie } (10 \times 2) = 26 \text{ elettroni di valenza}$$





Scrivi la struttura di Lewis dello ione carbonato (CO_3^{2-}).

Stadio 1: C è meno elettronegativo di O, metti C nel centro

Stadio 2: Conta gli elettroni di valenza C: 4 ($2s^2 2p^2$) e O: 6 ($2s^2 2p^4$)
+2 cariche negative ($2e^-$)

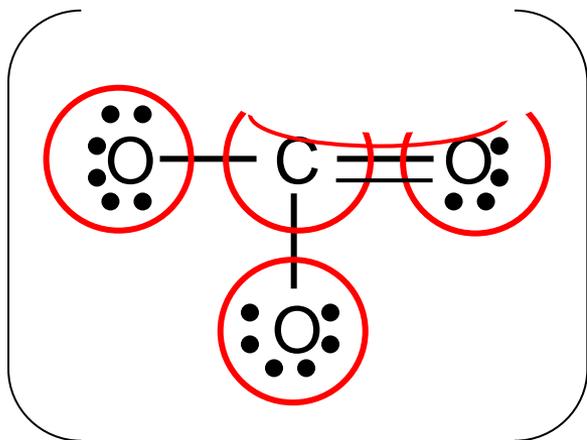
$$4 + (3 \times 6) + 2 = 24 \text{ elettroni di valenza}$$

Stadio 3: Disegna i legami singoli tra gli atomi C e O e completa l'ottetto sugli atomi C e O.

Stadio 4: Controlla, il n° degli e^- nella struttura è uguale al numero degli e^- di valenza?

$$3 \text{ legami singoli } (3 \times 2) + 10 \text{ coppie solitarie } (10 \times 2) = 26 \text{ elettroni di valenza}$$

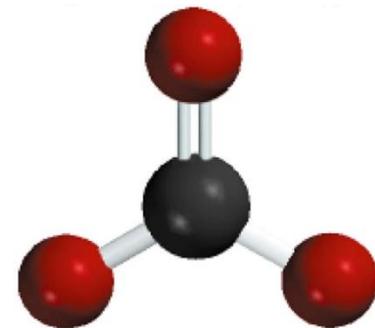
Stadio 5: Troppi elettroni, forma i doppi legami e controlla ancora il n° di e^-



2-

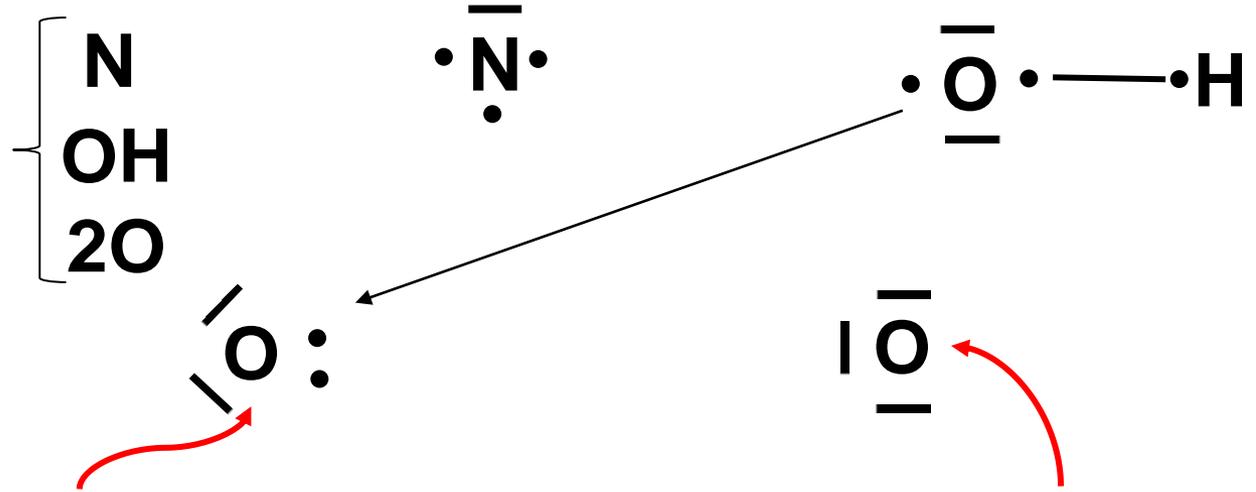
$$\begin{aligned} 2 \text{ legami singoli } (2 \times 2) &= 4 \\ 1 \text{ doppio legame} &= 4 \\ 8 \text{ coppie solitarie } (8 \times 2) &= 16 \\ \hline \end{aligned}$$

$$\text{Totale} = 24$$



Scrivere le Strutture di Lewis

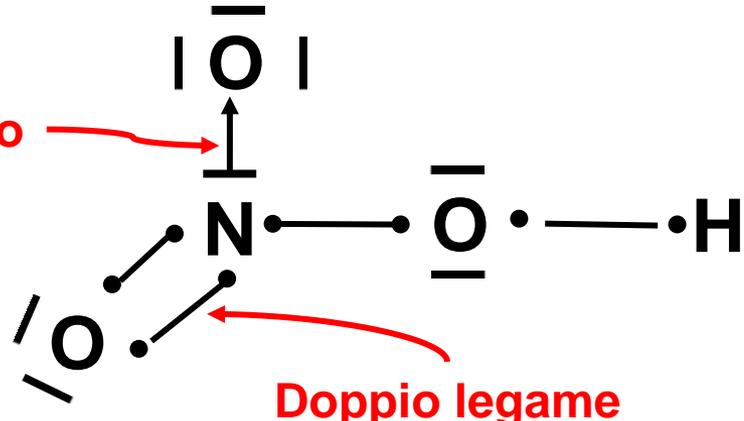
HNO_3



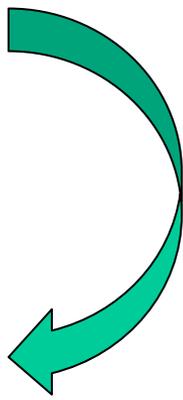
Configurazione dell'O elettroni spaiati

Configurazione dell'O con un orbitale vuoto

Legame dativo



Doppio legame



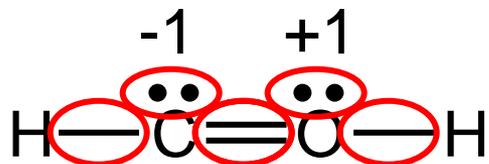
Carica formale e strutture di Lewis

La **carica formale** di un atomo è la differenza tra il numero degli elettroni di valenza in un atomo isolato e il numero di elettroni assegnati a quell'atomo nella struttura di Lewis

$$\begin{array}{l} \text{carica formale} \\ \text{di un atomo in} \\ \text{una struttura} \\ \text{di Lewis} \end{array} = \begin{array}{l} \text{numero degli} \\ \text{elettroni di} \\ \text{valenza} \\ \text{nell'atomo} \\ \text{libero} \end{array} - \begin{array}{l} \text{numero degli} \\ \text{elettroni non} \\ \text{legati} \end{array} - \frac{1}{2} \left(\begin{array}{l} \text{numero degli} \\ \text{elettroni di} \\ \text{legame} \end{array} \right)$$

La somma delle cariche formali degli atomi in una molecola o in uno ione deve essere 0 per una molecola e uguale alla carica per lo ione.

Carica formale e strutture di Lewis



C: 4 e⁻

O: 6 e⁻

$$\frac{2\text{H} - 2 \times 1 \text{ e}^-}{12 \text{ e}^-}$$

2 legami singoli (2 × 2) = 4

1 doppio legame = 4

$$\frac{2 \text{ coppie solitarie } (2 \times 2) = 4}{\text{Totale} = 12}$$

carica formale
di un atomo in
una struttura
di Lewis

=

numero degli
elettroni di
valenza
nell'atomo
libero

-

numero degli
elettroni non
legati

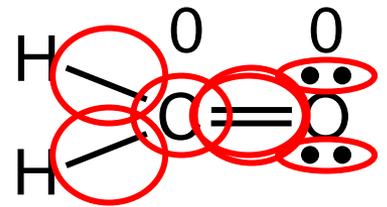
-

$\frac{1}{2}$ (numero degli
elettroni di
legame)

$$\text{carica formale di C} = 4 - 2 - \frac{1}{2} \times 6 = -1$$

$$\text{carica formale di O} = 6 - 2 - \frac{1}{2} \times 6 = +1$$

Carica formale e strutture di Lewis



$$\begin{array}{l}
 \text{C: } 4 e^- \\
 \text{O: } 6 e^- \\
 \hline
 2\text{H: } 2 \times 1 e^- \\
 \hline
 12 e^-
 \end{array}$$

$$\begin{array}{l}
 2 \text{ legami singoli } (2 \times 2) = 4 \\
 1 \text{ doppio legame} = 4 \\
 2 \text{ coppie solitarie } (2 \times 2) = 4 \\
 \hline
 \text{Totale} = 12
 \end{array}$$

carica formale di un atomo in una struttura di Lewis = numero degli elettroni di valenza nell'atomo libero - numero degli elettroni non legati - $\frac{1}{2}$ (numero degli elettroni di legame)

carica formale di C = $4 - 0 - \frac{1}{2} \times 8 = 0$

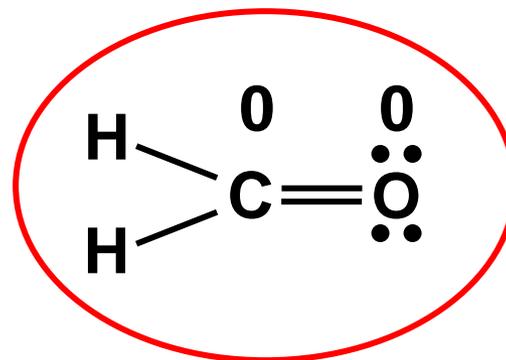
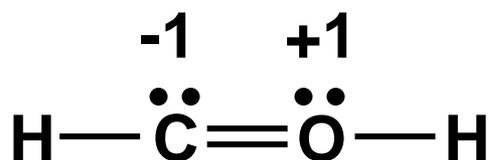
carica formale di O = $6 - 4 - \frac{1}{2} \times 4 = 0$

Carica formale e strutture di Lewis

1. Per molecole neutre, una struttura di Lewis in cui non ci sono cariche formali è preferibile ad una in cui sono presenti cariche formali.
2. Le strutture di Lewis con cariche formali grandi sono meno plausibili di quelle con cariche formali piccole.
3. Tra le varie strutture di Lewis con distribuzione simile di carica formale, la più plausibile è quella in cui le cariche formali negative sono poste sugli atomi più elettronegativi. Ossia quelle che hanno carica formale 0 o +1 sull'atomo centrale.



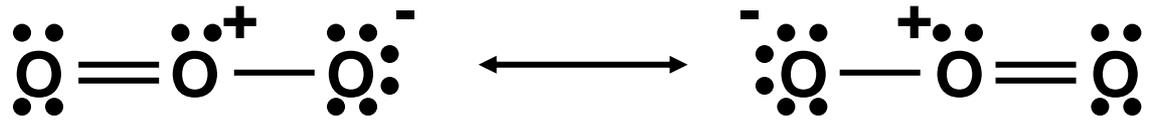
Qual è la struttura di Lewis più probabile per CH₂O?



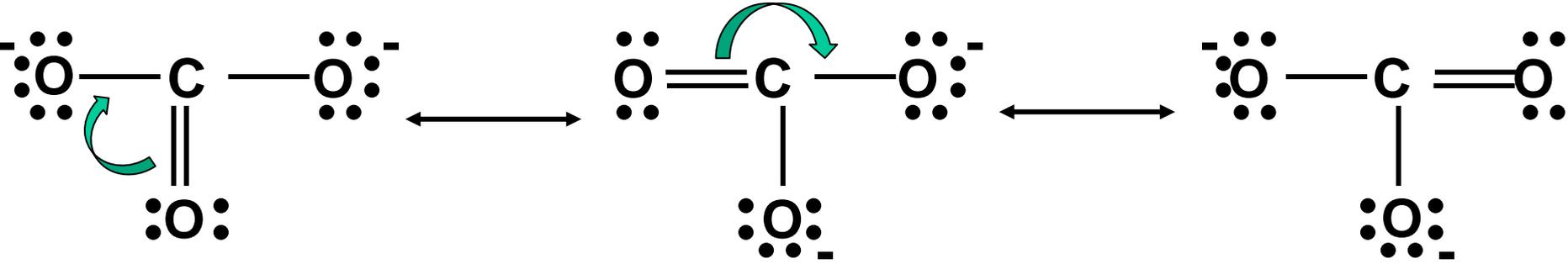
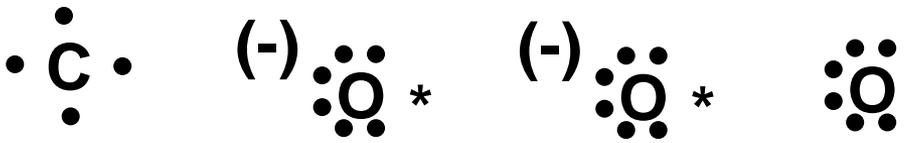
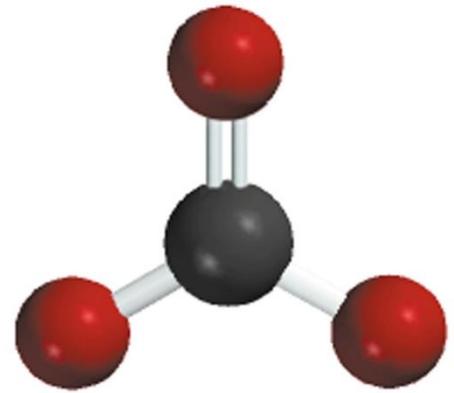
Le strutture di risonanza

Ogni volta che una molecola può essere rappresentata con più di una struttura elettronica, si dice che presenta il fenomeno di risonanza elettronica e le strutture prendono il nome di strutture di risonanza o strutture limite.

ozono



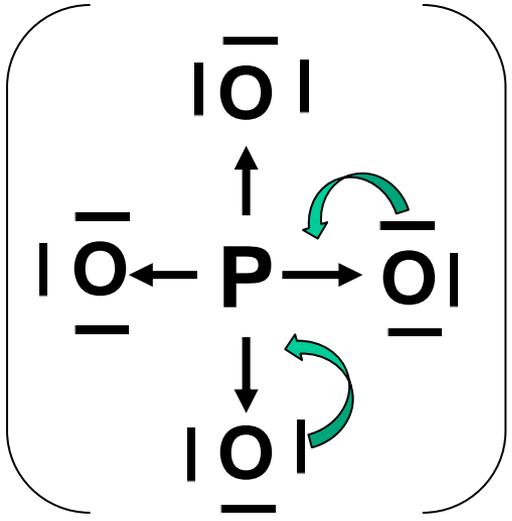
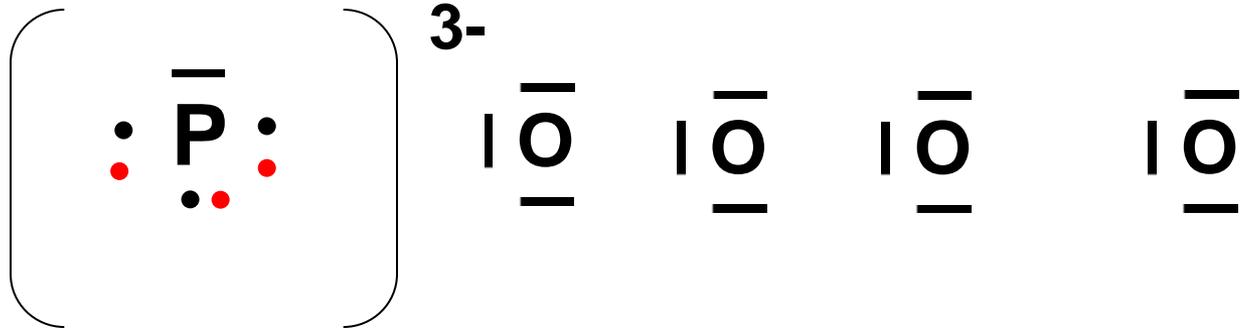
Quali sono le strutture di risonanza dello ione carbonato (CO_3^{2-}) ?



Le strutture di risonanza

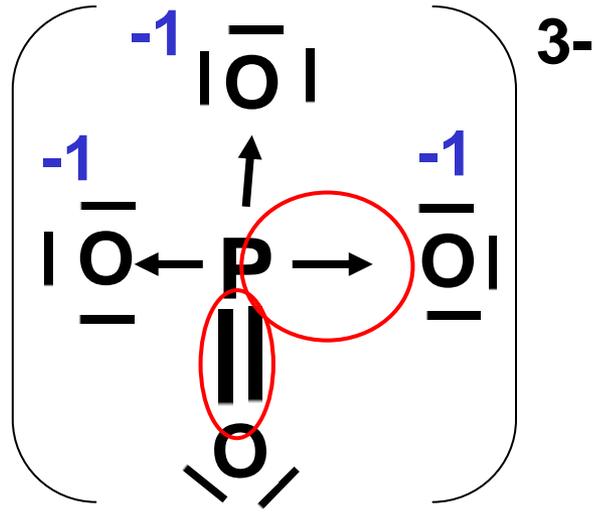
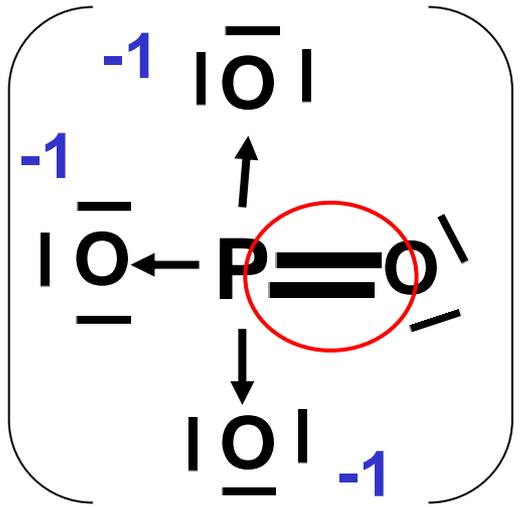


Ione fosfato



Ogni legame dativo può essere rappresentato con una struttura di risonanza del doppio legame perché l'atomo centrale (essendo del 3^a periodo) ha orbitali d da riempire (può essere pentavalente)

Ognuna di queste strutture può darne altre 3 a seconda della posizione del doppio legame



Le strutture di risonanza

SO₂



È sempre 2 se consideriamo un legame singolo o un doppio legame!

- Numero di coordinazione $nc = 2$
- Doppietti solitari $ds = 1$
- Numero sterico $ns = nc + ds = 3$

È responsabile della reattività della molecola

È responsabile della forma spaziale della molecola
E corrisponde alle coppie elettroniche attorno all'atomo centrale

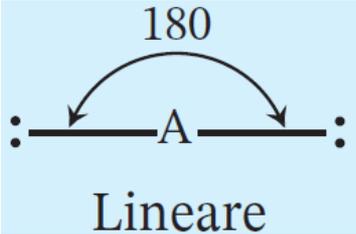
Le strutture di lewis e la geometria molecolare

- ❖ La struttura di una molecola è un'entità che non siamo in grado di rappresentare con lo schema dei legami formati da doppietti elettronici localizzati ma abbiamo il **fenomeno della risonanza**.
- ❖ Per cui la struttura elettronica vera si può rappresentare solo attraverso l'uso di legami che si originano sulla base di elettroni delocalizzati o in termini di interazione tra orbitali atomici pieni o vuoti (**teorie del legame covalente**)
- ❖ Ai fini della **geometria** di una molecola sono coinvolti tutti i doppietti presenti attorno all'atomo centrale, quindi sia quelli di legame che quelli solitari (appunto il **numero sterico**)

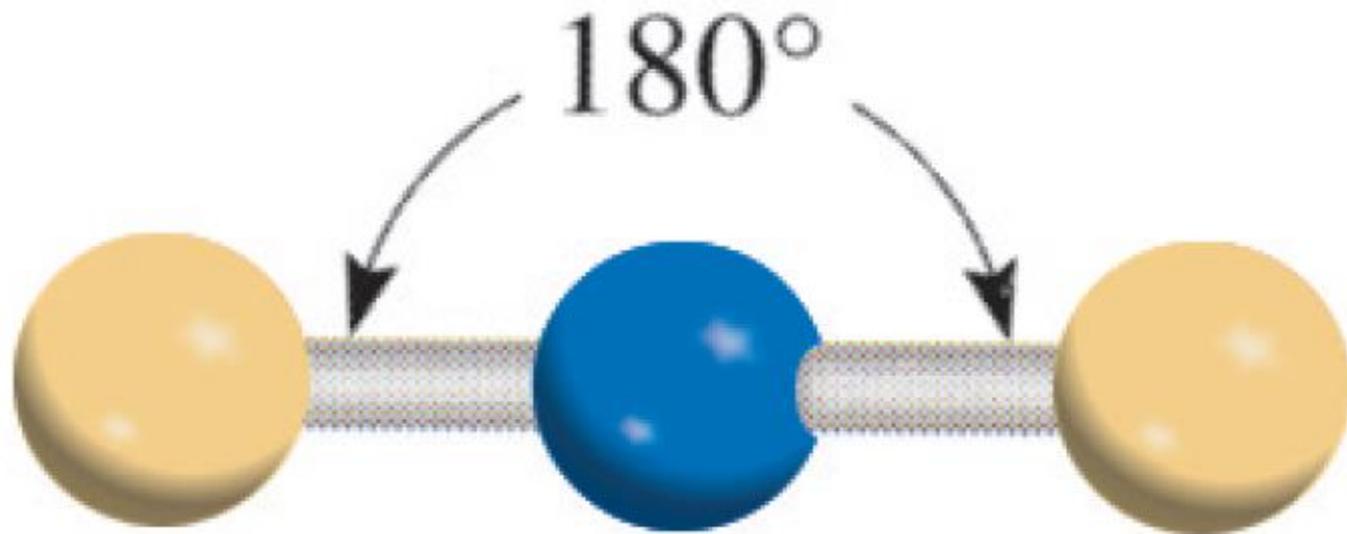
Formule di struttura e metodo V.S.E.P.R.

Prevede la geometria della molecole basandosi sulle repulsioni elettrostatiche tra coppie di elettroni (leganti e non leganti).

Gli atomi saranno disposti in modo da avere la maggiore repulsione (distanza) tra i doppietti elettronici

<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all'atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull'atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria molecolare</u>
AB_2	2	0	 <p>Lineare</p>	$B-A-B$ Lineare

Cloruro di Berillio



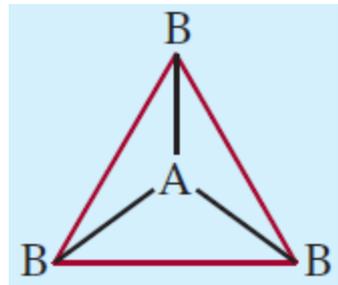
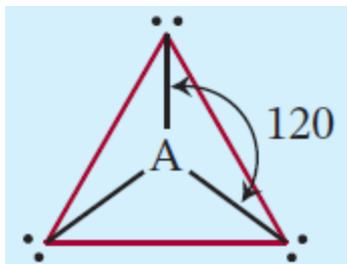
0 coppie solitarie sull'atomo centrale



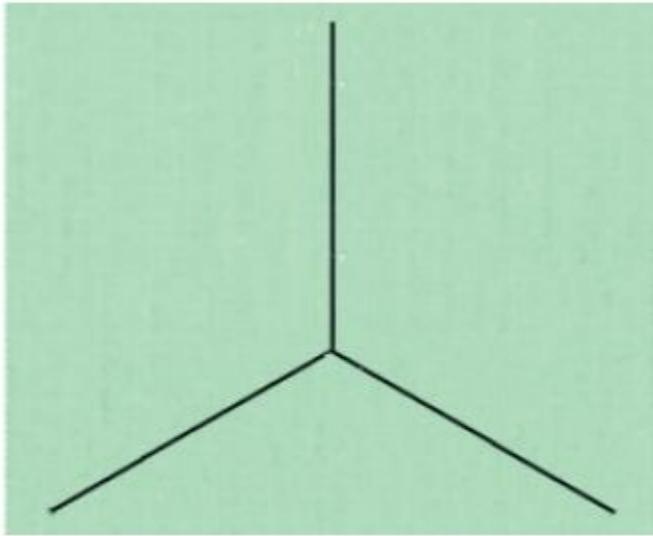
2 atomi legati all'atomo centrale

Formule di struttura e metodo V.S.E.P.R.

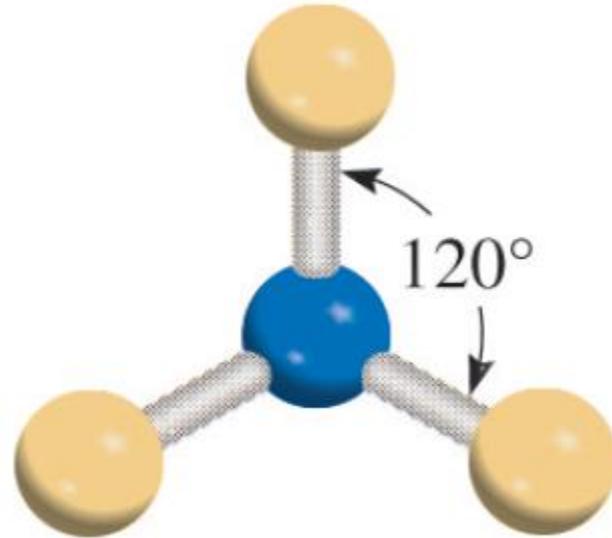
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all'atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull'atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
AB_2	2	0	lineare	lineare
AB_3	3	0	trigonale planare	trigonale planare



Trifluoruro di boro

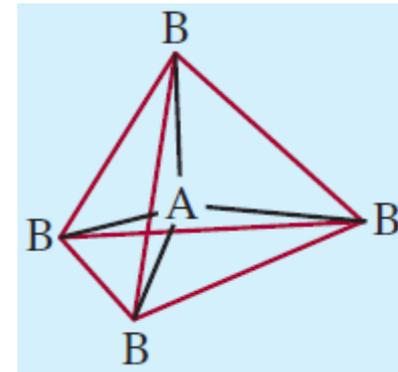
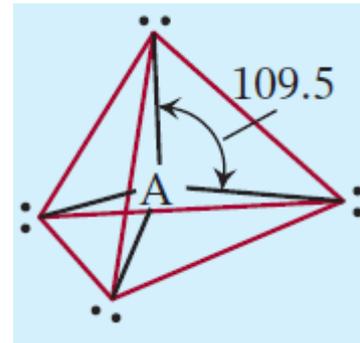


Trigonale planare

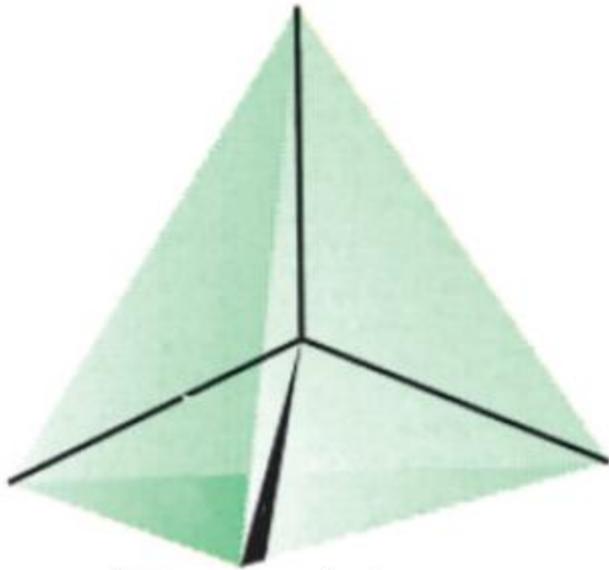


VSEPR

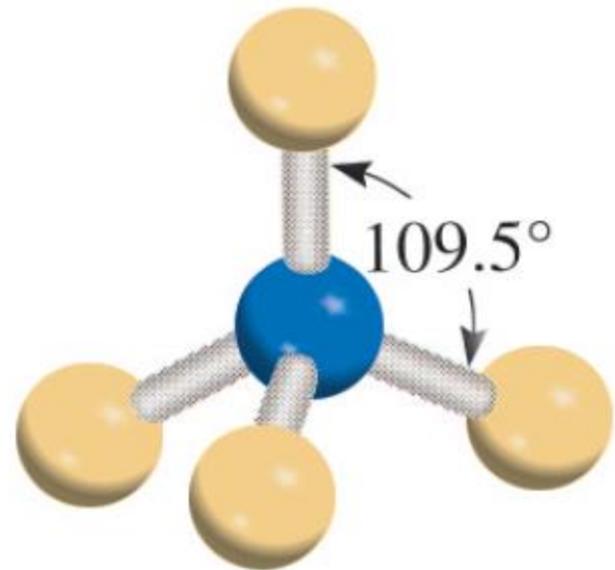
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all'atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull'atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
AB_2	2	0	lineare	lineare
AB_3	3	0	trigonale planare	trigonale planare
AB_4	4	0	tetraedrica	tetraedrica



Metano

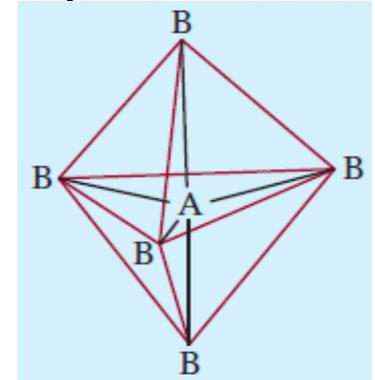
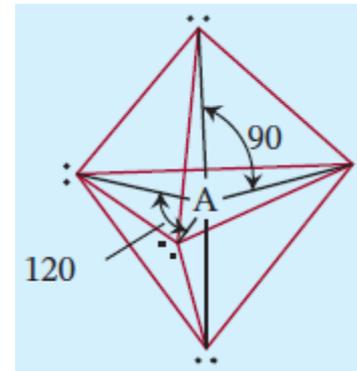


Tetraedrica

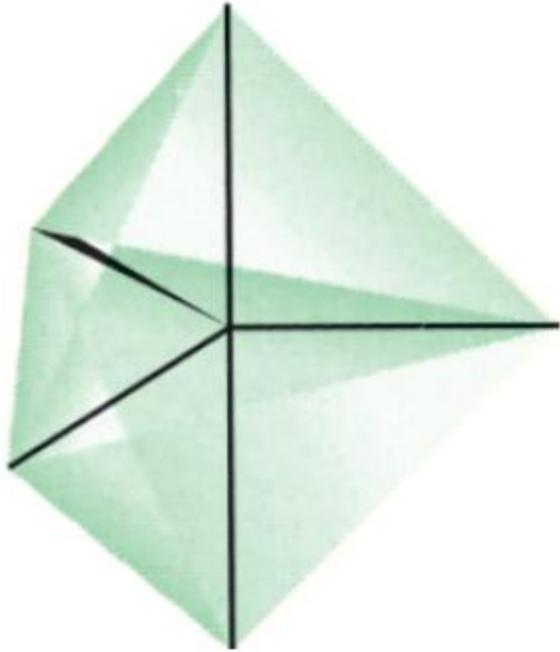


VSEPR

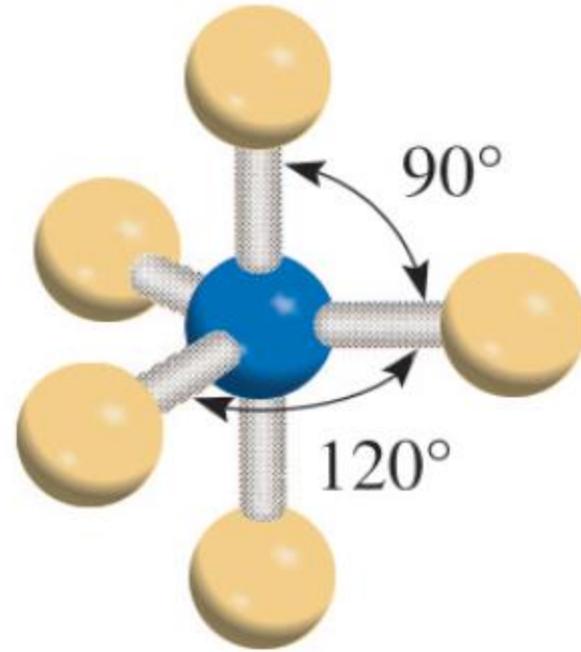
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all'atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull'atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
AB_2	2	0	lineare	lineare
AB_3	3	0	trigonale planare	trigonale planare
AB_4	4	0	tetraedrica	tetraedrica
AB_5	5	0	trigonale bipiramidale	trigonale bipiramidale



Pentaccloruro di fosforo

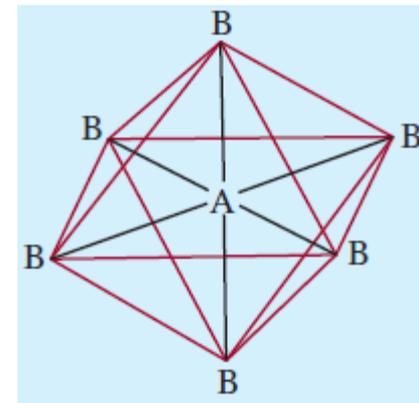
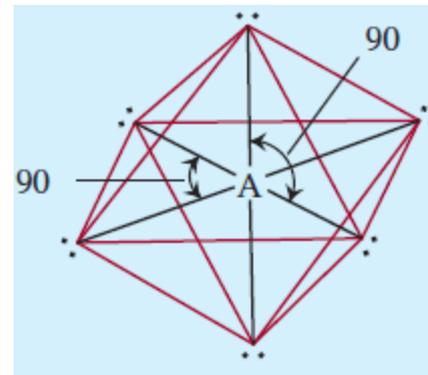


Trigonale
bipiramidale

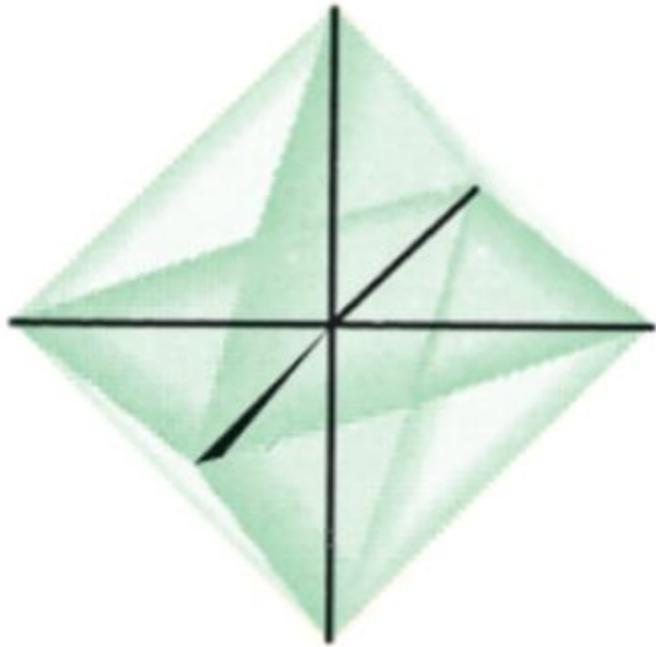


VSEPR

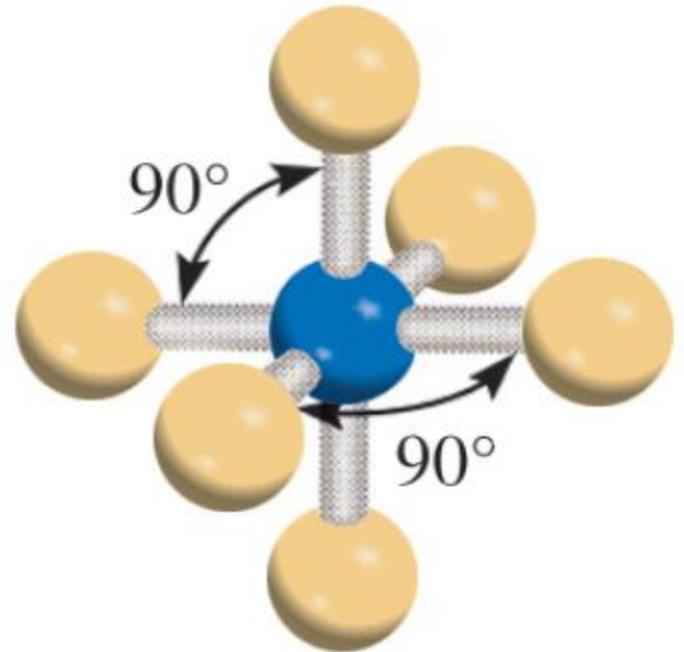
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all'atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull'atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
AB_2	2	0	lineare	lineare
AB_3	3	0	trigonale planare	trigonale planare
AB_4	4	0	tetraedrica	tetraedrica
AB_5	5	0	trigonale bipiramidale	trigonale bipiramidale
AB_6	6	0	ottaedrica	ottaedrica

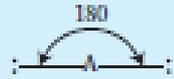
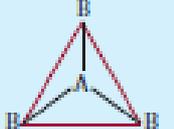
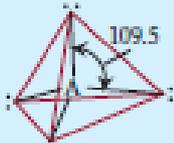
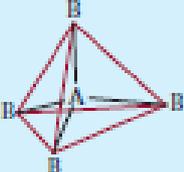
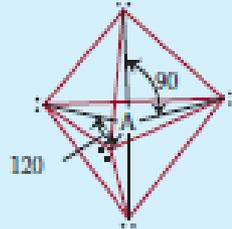
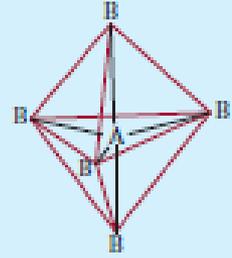
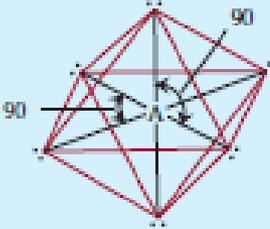
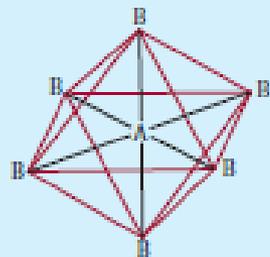


Esafluoruro di zolfo



Ottaedrica

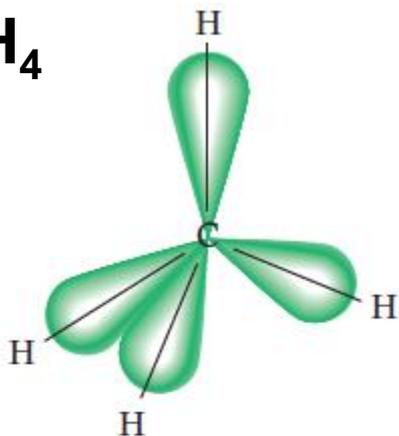


Numero di coppie di elettroni	Disposizione delle coppie di elettroni ⁺	Geometria molecolare ⁺	Esempi
2	 <p>Lineare</p>	$B-A-B$ Lineare	$BeCl_2, HgCl_2$
3	 <p>Trigonale planare</p>	 <p>Trigonale planare</p>	BF_3
4	 <p>Tetraedrica</p>	 <p>Tetraedrica</p>	CH_4, NH_4^+
5	 <p>Trigonale bipyramidale</p>	 <p>Trigonale bipyramidale</p>	PCl_5
6	 <p>Ottaedrica</p>	 <p>Ottaedrica</p>	SF_6

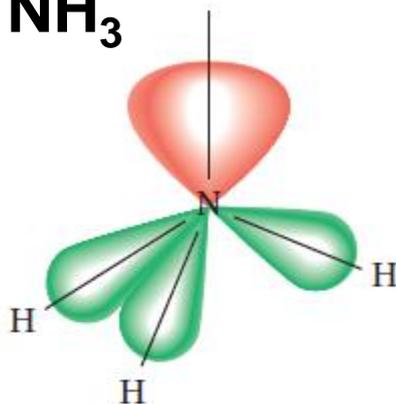
Molecole in cui l'atomo centrale è privo di coppie solitarie.

Cosa succede quando l'atomo centrale ha una o più coppie solitarie

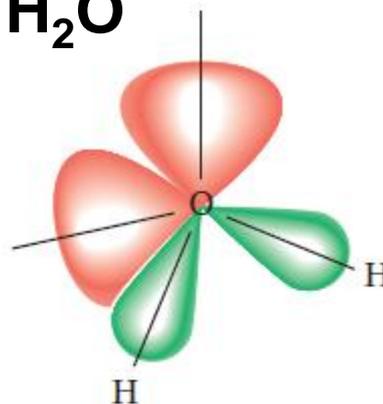
CH₄



NH₃

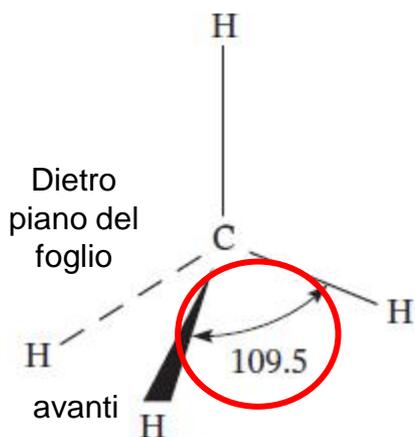


H₂O

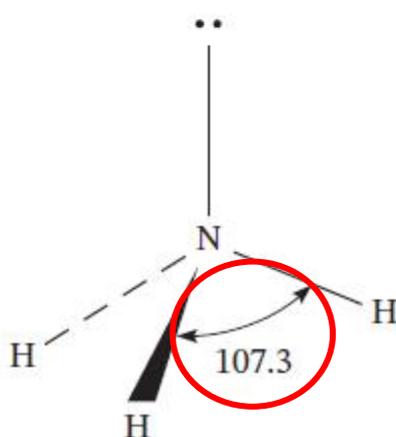


(a)

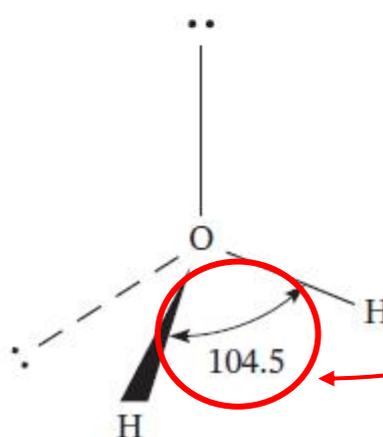
La repulsione dovuta al doppietto solitario è maggiore quindi abbiamo un restringimento dell'angolo di legame



repulsione
coppia solitaria vs.
coppia solitaria



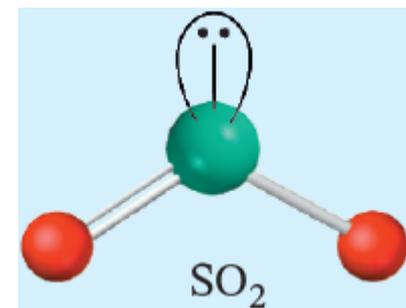
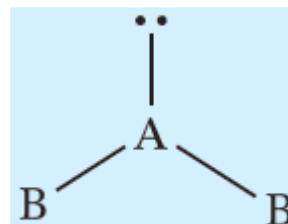
repulsione
coppia solitaria vs.
coppia di legame



repulsione
coppia di legame vs.
coppia di legame

VSEPR

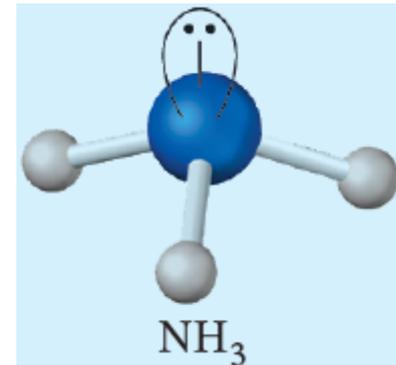
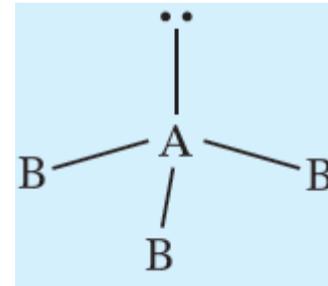
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all'atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull'atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
AB_3	3	0	trigonale planare	trigonale planare
AB_2E	2	1	trigonale planare	Angolare piegata



Anidride solforosa

VSEPR

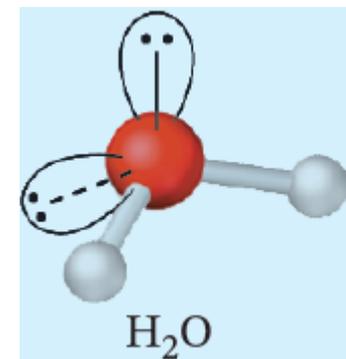
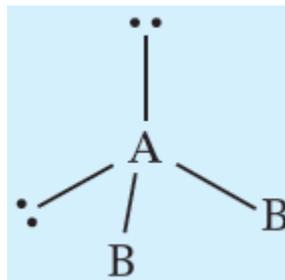
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all'atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull'atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
AB_4	4	0	tetraedrica	tetraedrica
AB_3E	3	1	tetraedrica	trigonale piramidale



Ammoniaca

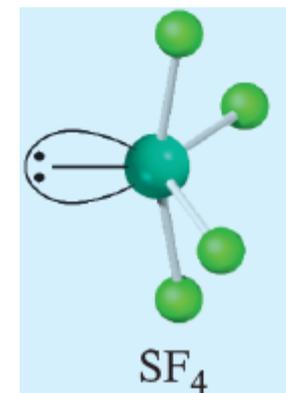
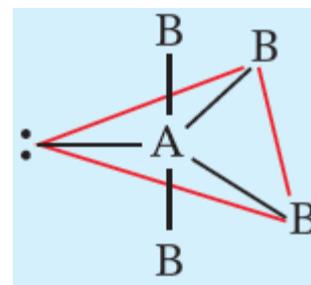
VSEPR

<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all'atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull'atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
AB_4	4	0	tetraedrica	tetraedrica
AB_3E	3	1	tetraedrica	trigonale piramidale
AB_2E_2	2	2	tetraedrica	Angolare piegata



VSEPR

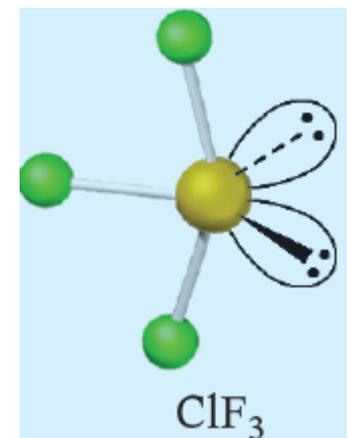
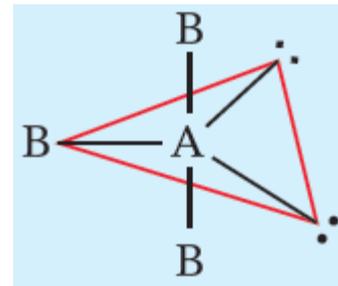
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all'atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull'atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
AB_5	5	0	trigonale bipiramidale	trigonale bipiramidale
AB_4E	4	1	trigonale bipiramidale	tetraedro distorto



Tetrafluoruro di zolfo

VSEPR

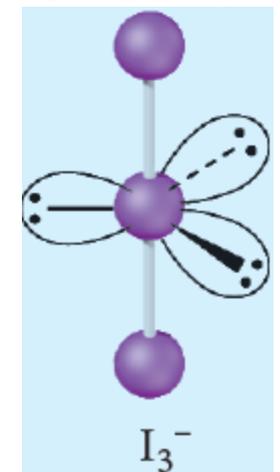
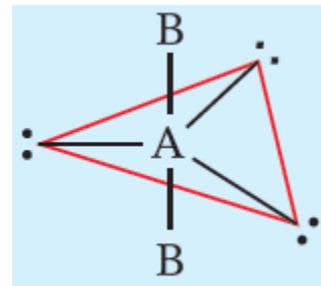
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all'atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull'atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
AB_5	5	0	trigonale bipiramidale	trigonale bipiramidale
AB_4E	4	1	trigonale bipiramidale	tetraedro distorto
AB_3E_2	3	2	trigonale bipiramidale	forma a T



Trifluoruro di cloro

VSEPR

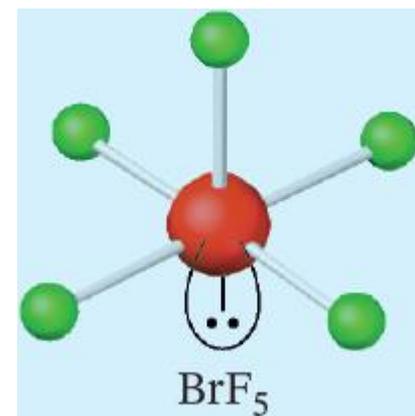
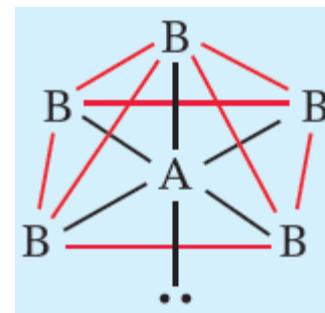
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all'atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull'atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
AB_5	5	0	trigonale bipiramidale	trigonale bipiramidale
AB_4E	4	1	trigonale bipiramidale	tetraedro distorto
AB_3E_2	3	2	trigonale bipiramidale	forma a T
AB_2E_3	2	3	trigonale bipiramidale	lineare



lone triioduro

VSEPR

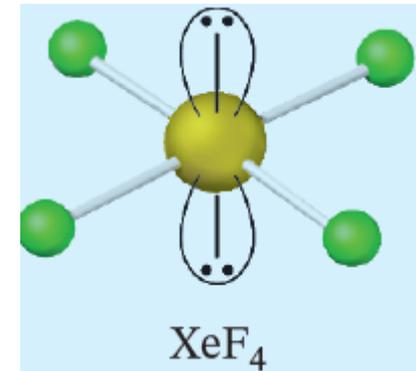
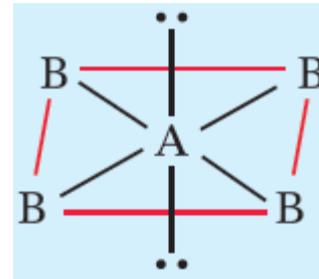
<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all'atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull'atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
AB_6	6	0	ottaedrica	ottaedrica
AB_5E	5	1	ottaedrica	quadrato piramidale



Pentafluoruro di bromo

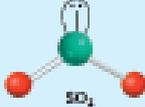
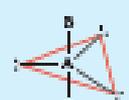
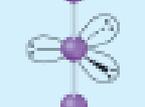
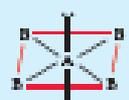
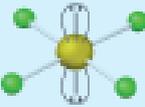
VSEPR

<u>Classe</u>	<u># di atomi legati all'atomo centrale</u>	<u># di coppie solitarie sull'atomo centrale</u>	<u>Disposizione delle coppie di elettroni</u>	<u>Geometria Molecolare</u>
AB_6	6	0	ottaedrica	ottaedrica
AB_5E	5	1	ottaedrica	quadrato piramidale
AB_4E_2	4	2	ottaedrica	quadrato planare



Tetrafluoruro di xeno

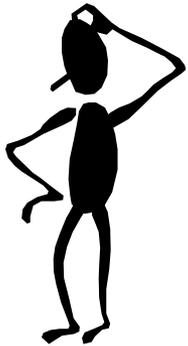
Tabella 7.2 Geometria di molecole e ioni semplici in cui l'atomo centrale presenta una o più coppie solitarie

Classe di molecola	Numero totale di coppie di elettroni	Numero di coppie di legami	Numero di coppie solitarie	Disposizione delle coppie di elettroni ^a	Geometria	Esempi
AB_2E	3	2	1	 Trigonale planare	Angolare (pioggia)	 SO_2
AB_3E	4	3	1	 Tetraidrica	Trigonale piramidale	 NH_3
AB_2E_2	4	2	2	 Tetraidrica	Angolare (pioggia)	 H_2O
AB_4E	5	4	1	 Trigonale bipyramidale	Tetraedro distorto (o casaleatico)	 SF_4
AB_3E_2	5	3	2	 Trigonale bipyramidale	A forma di T	 ClF_3
AB_2E_3	5	2	3	 Trigonale bipyramidale	Lineare	 I_3^-
AB_6E	6	6	0	 Ottaidrica	Piramidale quadrata	 BrF_6
AB_5E_2	6	4	2	 Ottaidrica	Quadrato planare	 XeF_4

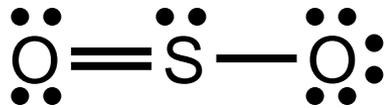
^a Le linee colorate sono utilizzate per mostrare la forma globale della molecola ma non i legami.

Determinare la Geometria Molecolare

1. Scrivi la struttura di Lewis della molecola.
2. Conta il numero di coppie solitarie sull'atomo centrale e il numero di atomi legati all'atomo centrale.
3. Usa il modello VSEPR per determinare la geometria della molecola

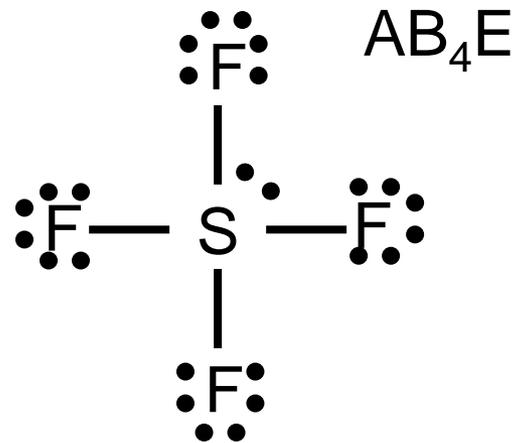
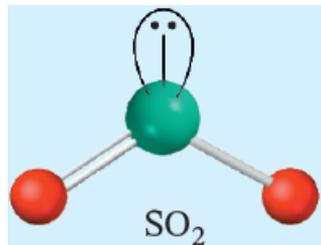


Quali sono le geometrie molecolari di SO_2 e SF_4 ?

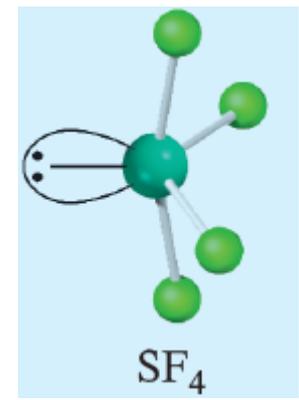


AB_2E

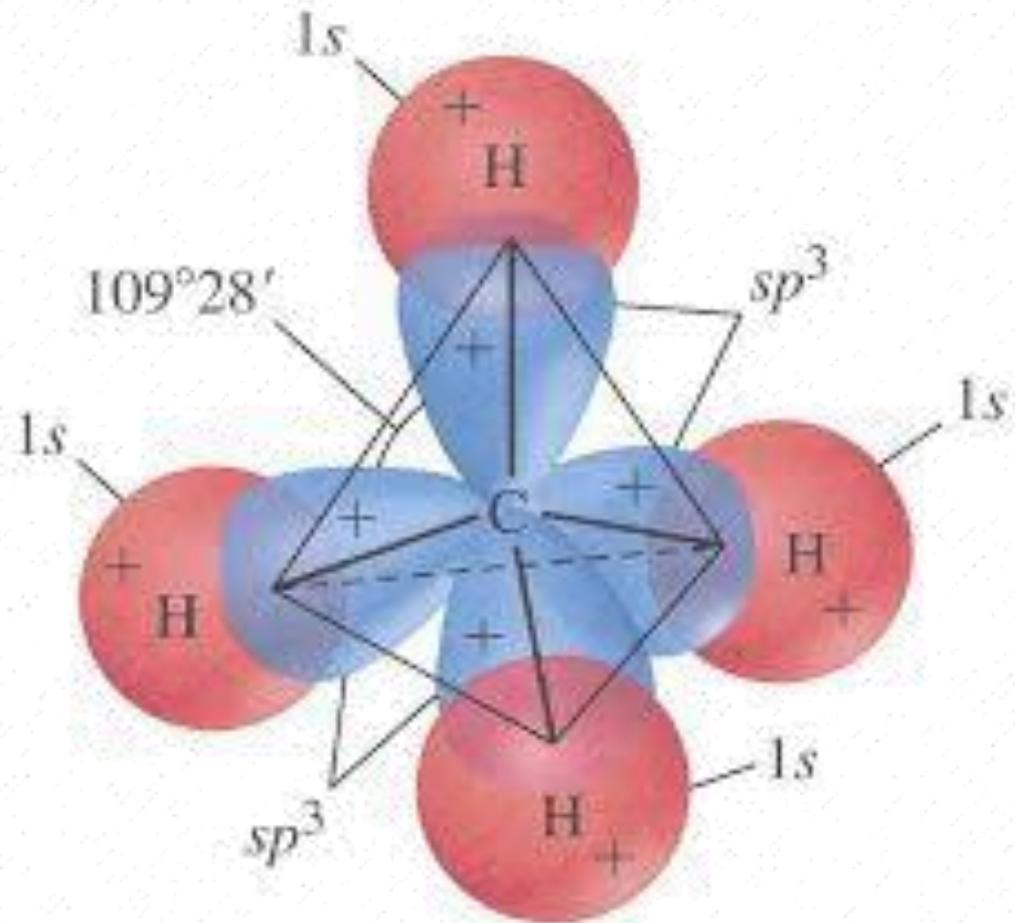
Angolare



tetraedro
distorto



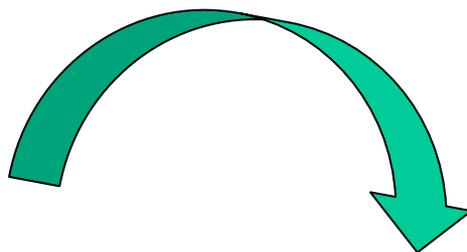
Teorie del legame covalente



Teorie del legame covalente

La teoria di Lewis non spiega la diversa energia di legame e lunghezza di legame dovuta al medesimo meccanismo di condivisione di elettroni che avviene nel legame covalente tra due atomi H e due atomi di F, rispettivamente nella molecola di idrogeno e nella molecola di fluoro

	<u>Energia di dissociazione di legame</u>	<u>Lunghezza di legame</u>
H ₂	436.4 kJ/mole	74 pm
F ₂	150.6 kJ/mole	142 pm



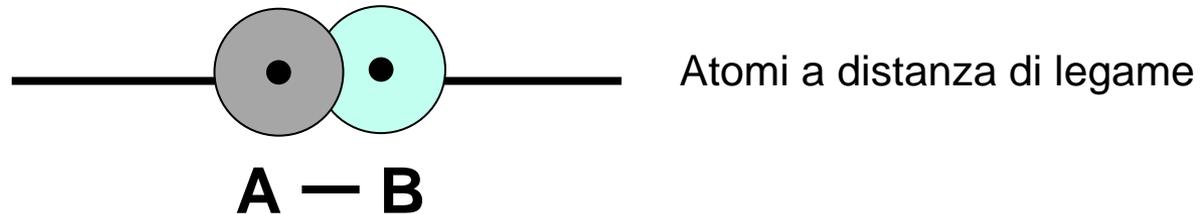
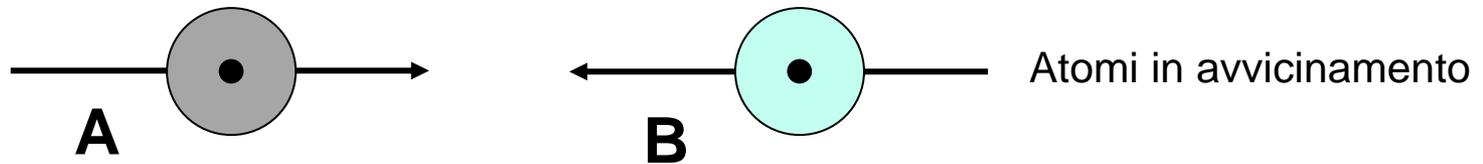
Teoria del legame di valenza o VB

Teoria degli orbitali molecolari o MO

Teorie del legame covalente

Teoria del legame di valenza o VB

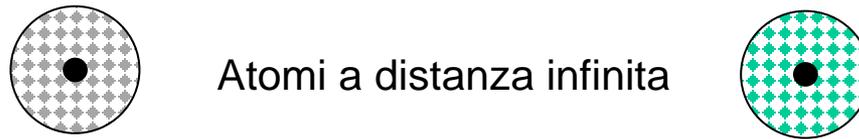
I legami si originano per sovrapposizione degli orbitali di identica simmetria e di comparabile energia. Inoltre, poiché un legame prevede l'intervento di una coppia di elettroni, gli orbitali che si sovrappongono devono contenere o entrambi un elettrone oppure uno deve essere pieno ed uno vuoto



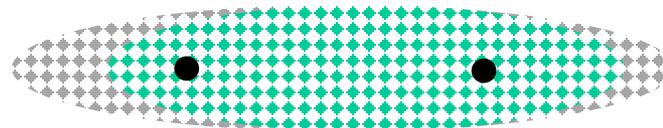
Teorie del legame covalente

Teoria degli orbitali molecolari o MO

Quando gli atomi si avvicinano per legarsi man mano che diminuisce la distanza i loro orbitali cominciano a modificarsi. Quando arrivano alla distanza di legame i loro orbitali iniziali risultano completamente modificati, i nuovi orbitali che si formano non sono più localizzati sugli atomi di partenza ma sono estesi, delocalizzati sull'intera molecola, per questo si parla di orbitali molecolari.



Atomi in avvicinamento con orbitali espansi e deformati



Atomi legati con orbitali estesi

MO
Orbitali molecolari

Teoria del legame di valenza o VB

Teoria del legame di valenza: i legami sono formati dalla condivisione di e^- ottenuta mediante **sovrapposizione di orbitali atomici**.



In che modo la teoria di Lewis spiega i legami in H_2 e F_2 ?

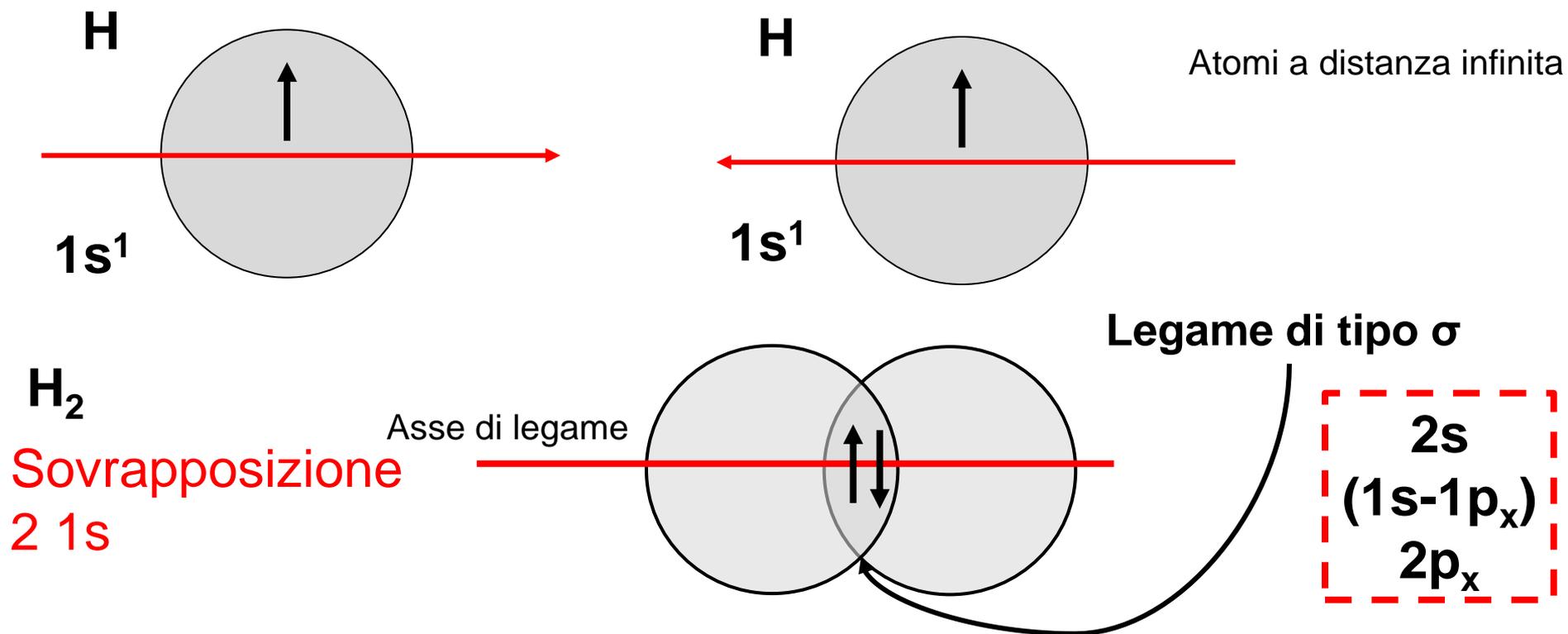
Con la teoria VB viene fatto un passo avanti rispetto alla teoria di Lewis; dato che gli orbitali coinvolti non sono sempre dello stesso tipo, abbiamo energie di legame e lunghezze di legame differenti

<u>Energia di dissociazione di legame</u>	<u>Lunghezza di legame</u>	<u>Sovrapposizione</u>
H_2 436.4 kJ/mole	74 pm	2 1s
F_2 150.6 kJ/mole	142 pm	2 2p

Teoria del legame di valenza o VB

Descrizione del legame nella molecola H_2

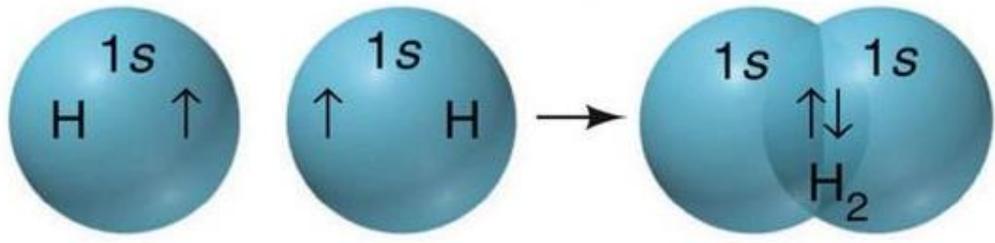
- Bisogna visualizzare le configurazioni elettroniche di valenza degli atomi isolati che devono sovrapporsi una volta giunta la distanza di legame
- Gli orbitali in questione devono avere energie comparabili e stessa simmetria
- La sovrapposizione deve produrre una effettiva forza attrattiva



Quando la nuvola di carica di sovrapposizione dei due orbitali è localizzata lungo l'asse di legame (è simmetrica e massima lungo l'asse di legame)

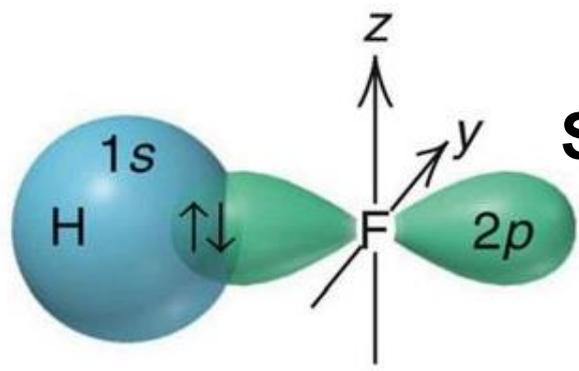
Teoria del legame di valenza o VB

Legame di tipo σ



idrogeno, H_2

Sovrapposizione di 2 orbitali $1s$

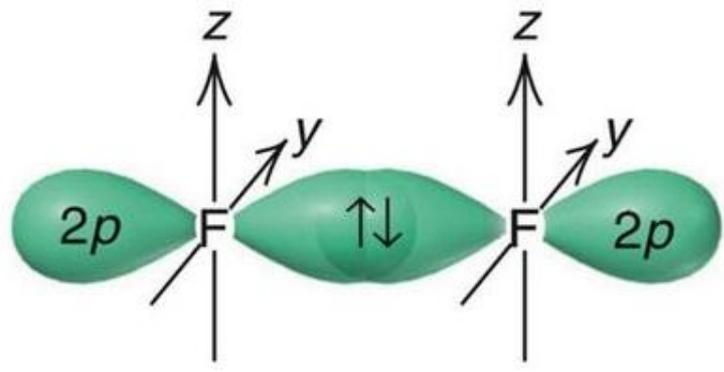


fluoruro di idrogeno, HF

Sovrapposizione di $1s$ con $2p_x$

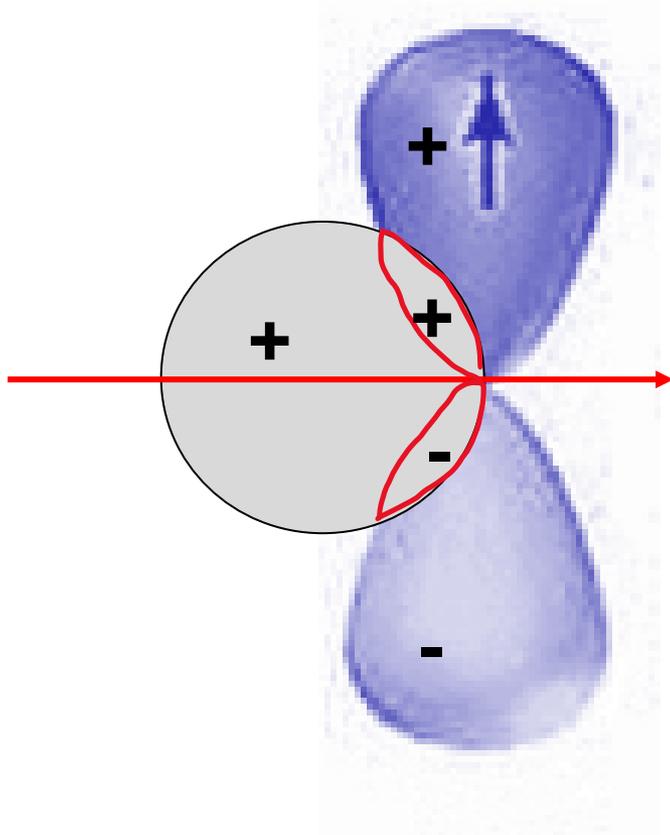
Sovrapposizione di 2 orbitali $2p_x$

fluoro, F_2



Teoria del legame di valenza o VB

Fluoruro di idrogeno

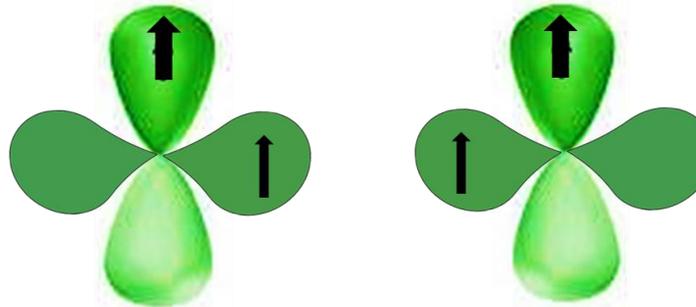
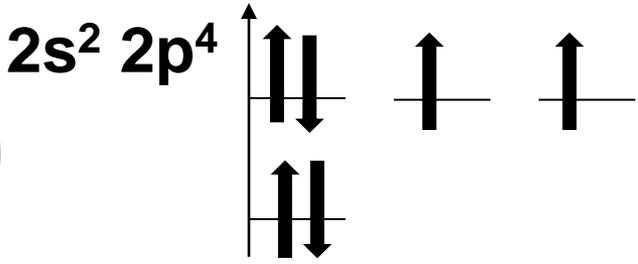
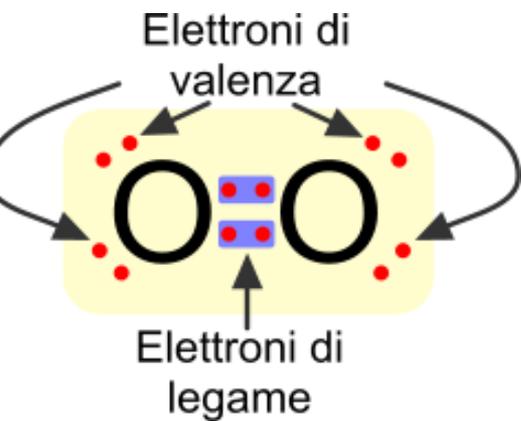


Se il F si avvicinasse all'H con l'orbitale p perpendicolare all'asse nucleare, la sovrapposizione non produrre legame in quanto gli orbitali devono avere la stessa simmetria rispetto all'asse di legame.

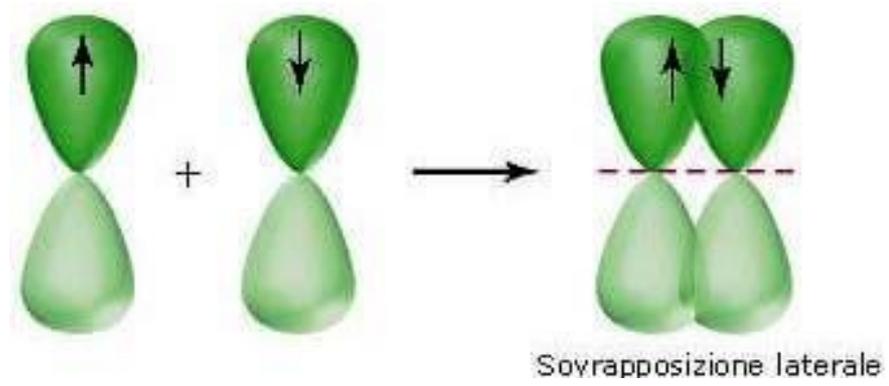
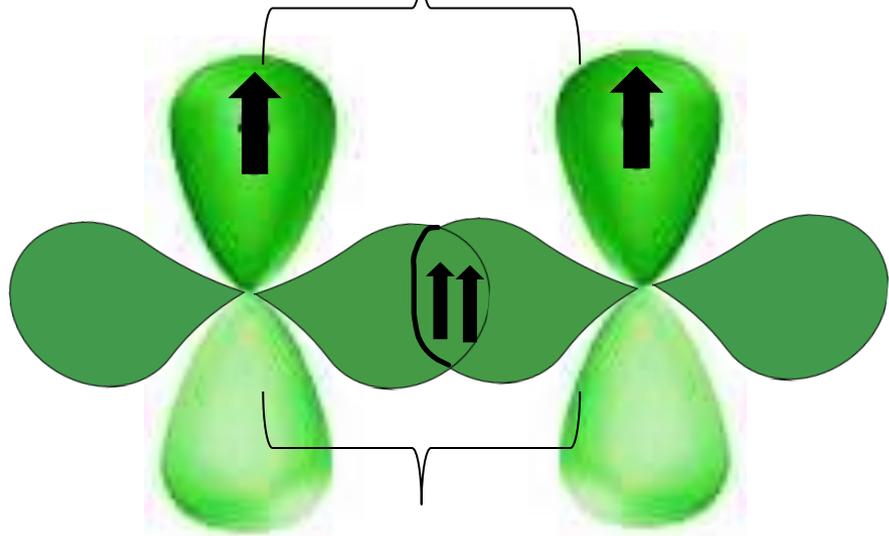
Qui le due zone di sovrapposizione sono uguali ma di segno opposto per cui la loro sommatoria è nulla, la sovrapposizione non è efficace per il legame.

Teoria del legame di valenza o VB

Descrizione del legame nella molecola O₂



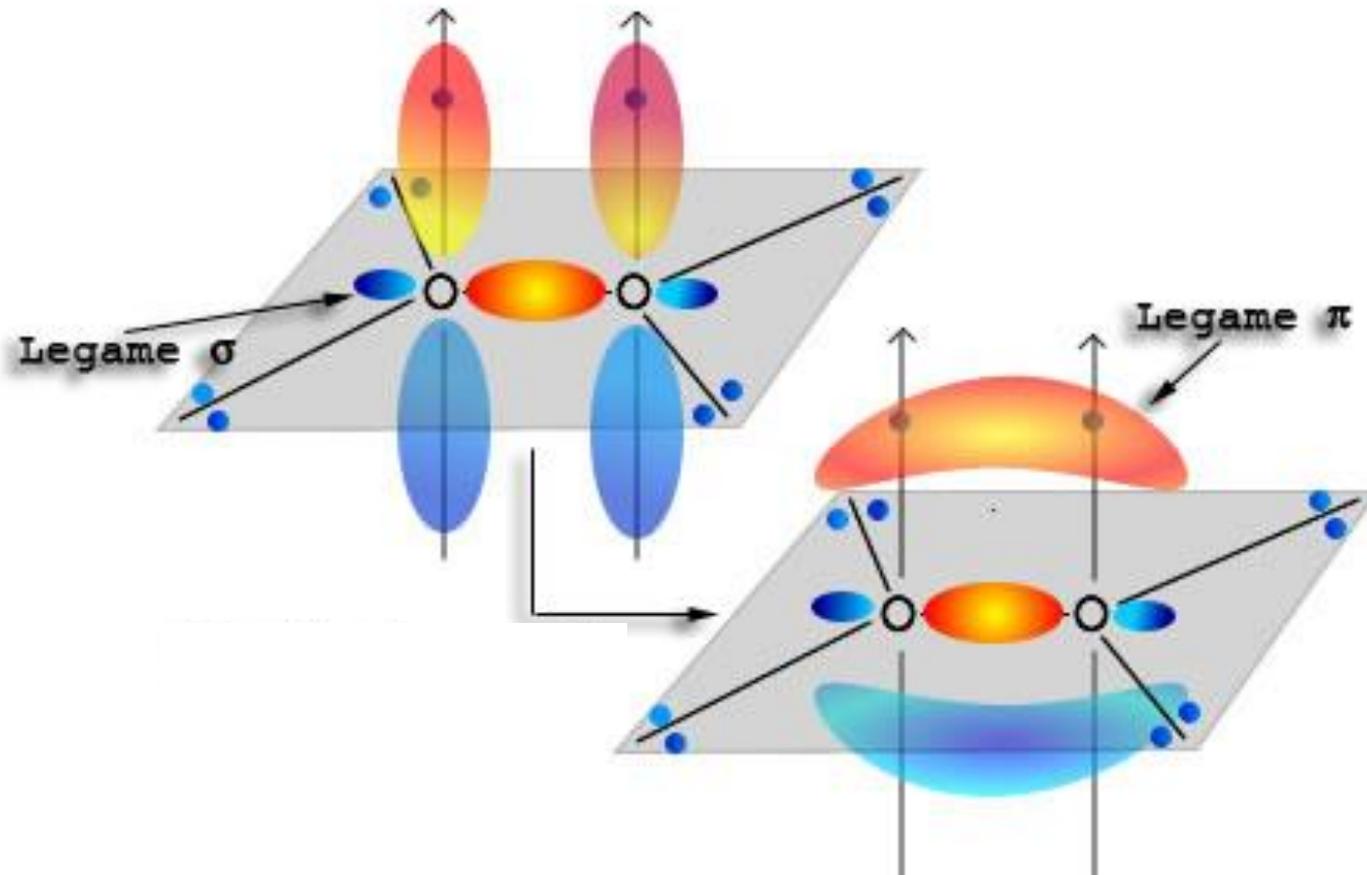
Legame di tipo π



Legame di tipo σ

Teoria del legame di valenza o VB

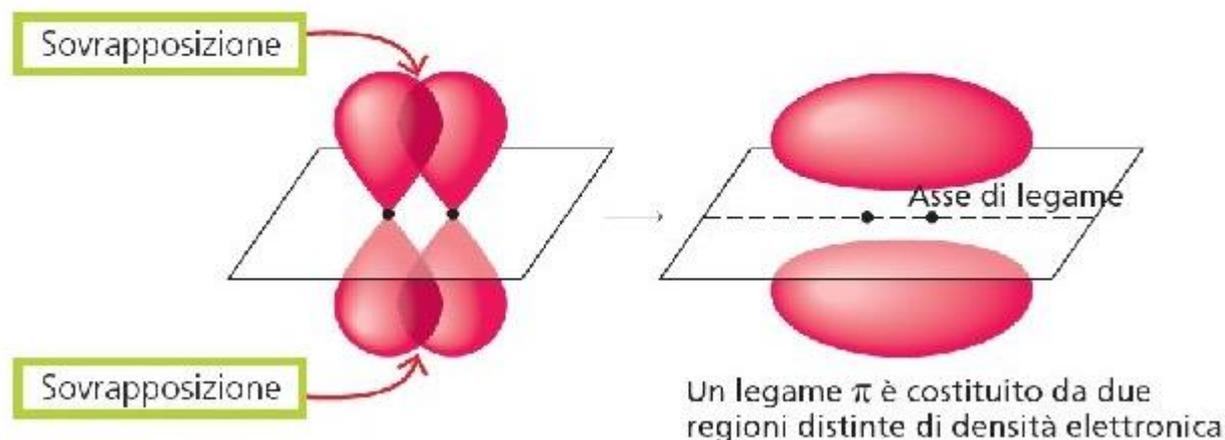
Descrizione del legame nella molecola O_2



Teoria del legame di valenza o VB

Legame di tipo π

I legami che si formano per sovrapposizione laterale di orbitali p si chiamano **legami pi greco (legami π)**.



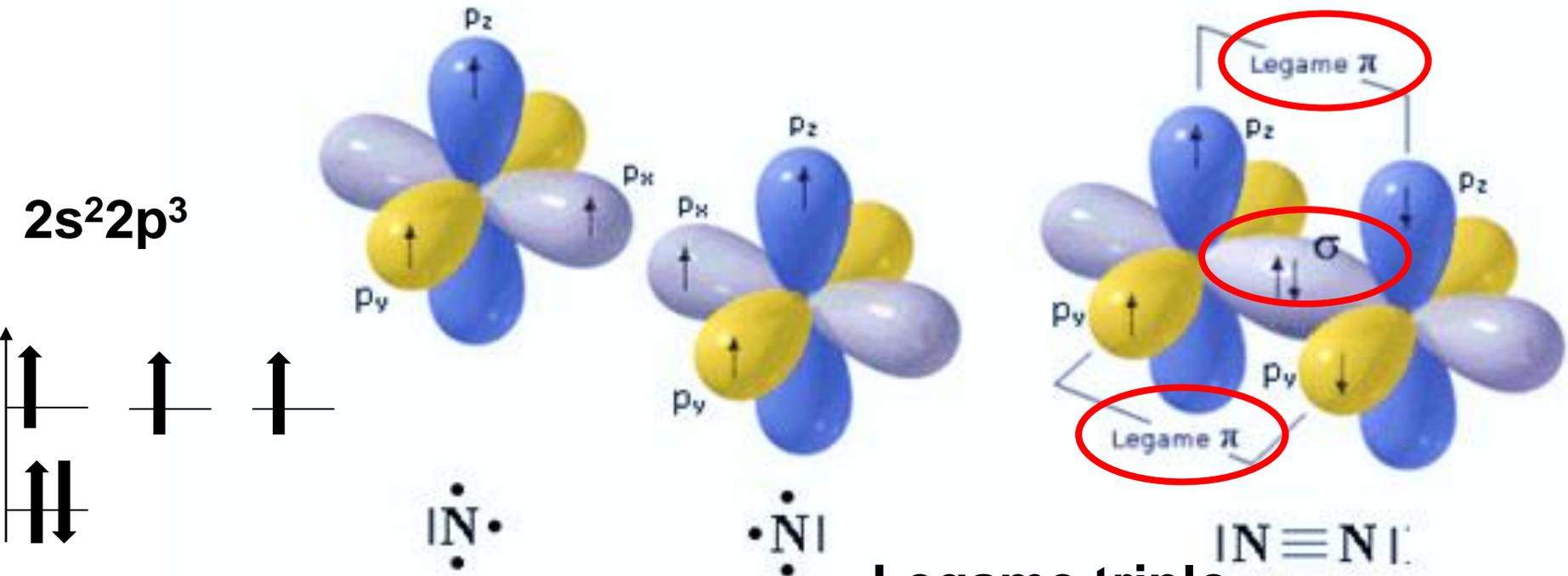
$(p_y - p_y)$

$(p_z - p_z)$

Quando la nuvola di carica di sovrapposizione è nulla lungo l'asse di legame ed è massima al di sopra o al di sotto dell'asse

Teoria del legame di valenza o VB

La molecola N₂



Legame triplo

- 1 legame σ ($p_x - p_x$)
- 1 legame π ($p_y - p_y$)
- 1 legame π ($p_z - p_z$)

Legami Sigma (σ) and Pi greco (π)

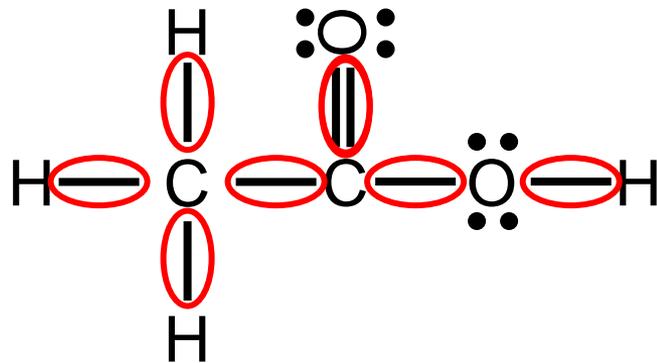
Legame singolo 1 legame sigma

Legame doppio 1 legame sigma e 1 legame pi greco

Legame triplo 1 legame sigma e 2 legami pi greco



Quanti legami σ e π sono presenti nella molecola di acido acetico CH_3COOH ?

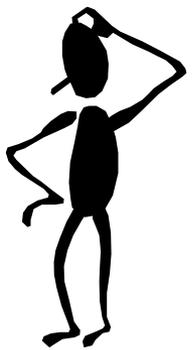
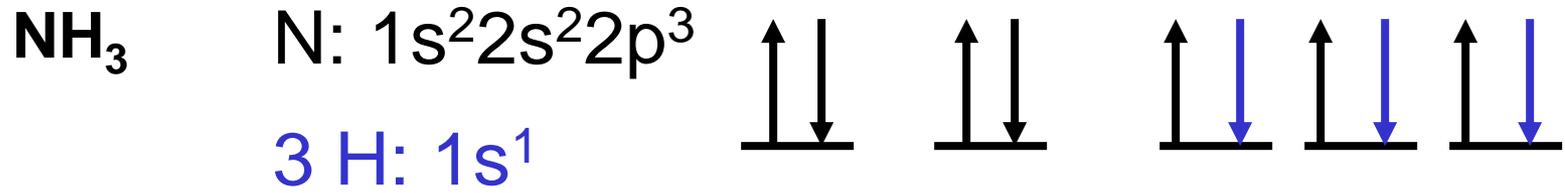


legami $\sigma = 6 + 1 = 7$

legami $\pi = 1$

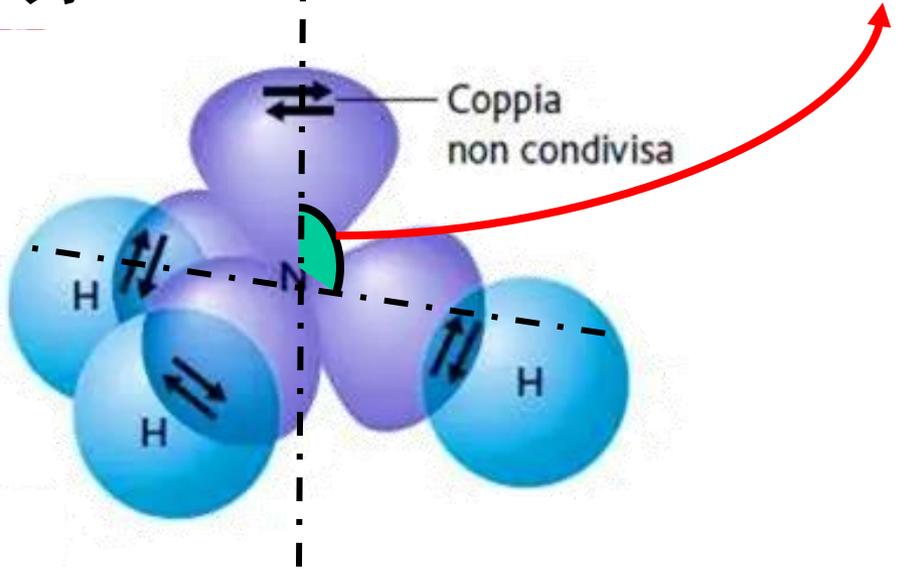
Gli orbitali ibridi

Teoria del legame di valenza della molecole poliatomiche

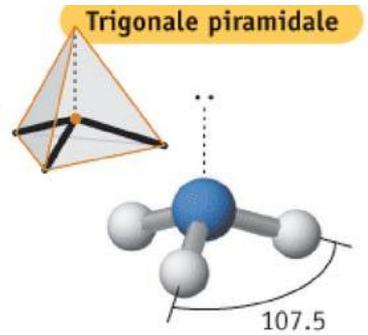


Se il legame si forma dalla sovrapposizione di 3 orbitali 2p dell'azoto con l'orbitale 1s di ciascun atomo di idrogeno, quale dovrebbe essere la geometria di NH_3 ?

se uso i 3 orbitali 2p prevedo circa 90°



l'angolo di legame sperimentale di H-N-H è 107.3°

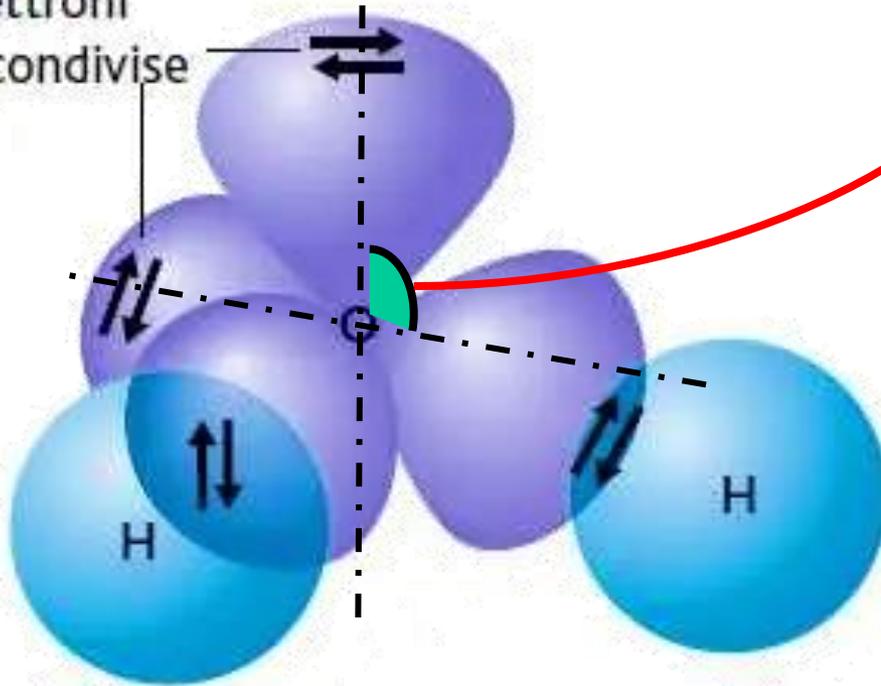


Gli orbitali ibridi

Teoria del legame di valenza della molecole poliatomiche

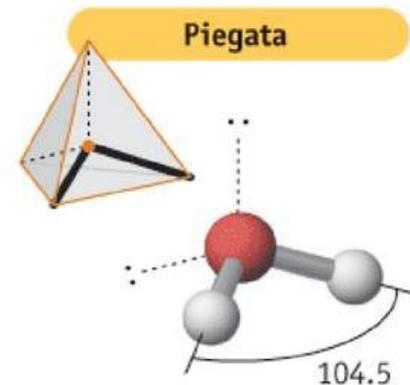


Coppie
di elettroni
non condivise



se uso i 2 orbitali p di O e l'orbitale 1s di H
prevedo circa 90°

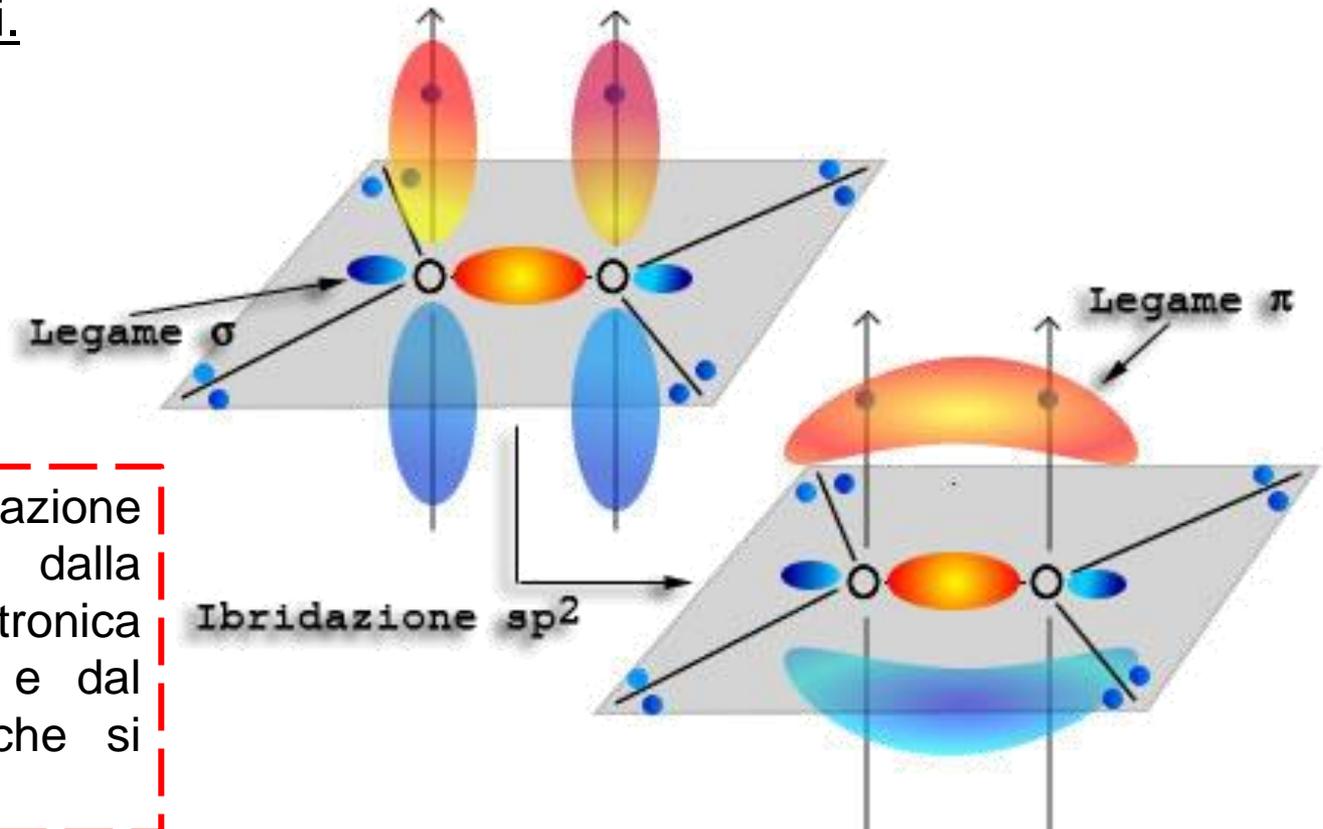
l'angolo di legame sperimentale di
H-O-H
è
 $104,5^\circ$



Gli orbitali ibridi

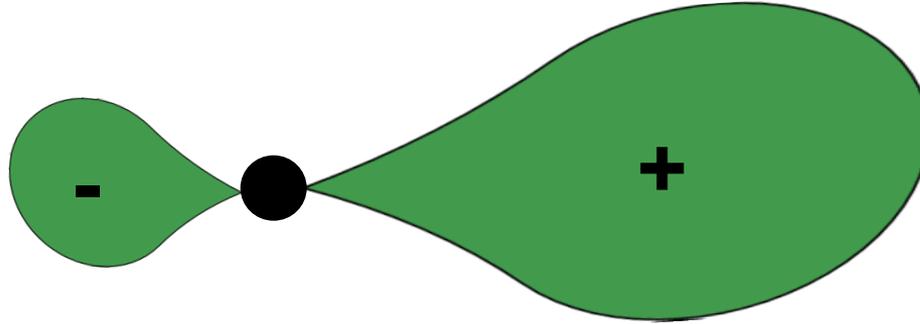
Possiamo ricavare il vero angolo di legame, solo ricorrendo agli **orbitali ibridi**. Gli orbitali atomici puri esistono come tali solo sugli atomi isolati. Quando due o più atomi si avvicinano per legarsi (a causa delle repulsioni elettrostatiche), gli orbitali atomici di ogni singolo atomo si modifica assumendo una nuova forma che prende il nome di orbitale ibrido.

Pertanto gli orbitali ibridi si formano per modificazione o mescolamento degli orbitali atomici puri.



Il tipo di ibridazione dipende dalla configurazione elettronica dell'atomo centrale e dal numero di atomi che si legano

Gli orbitali ibridi



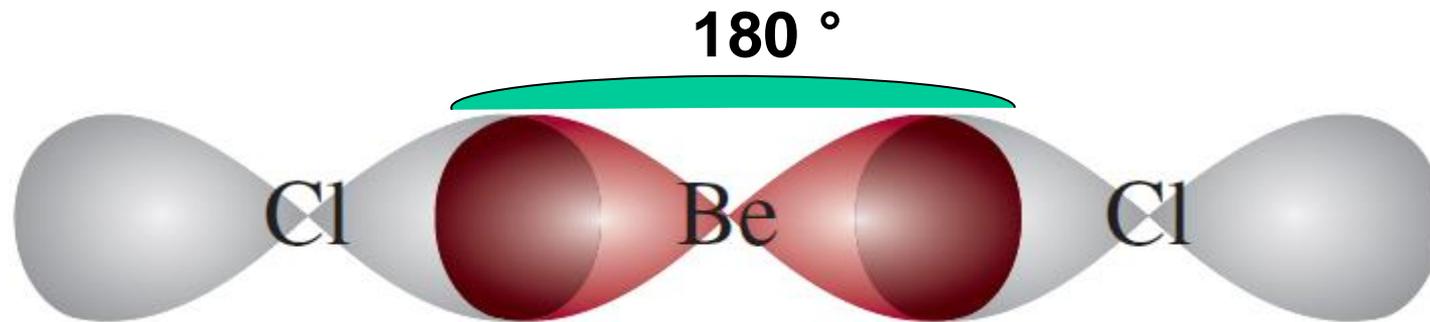
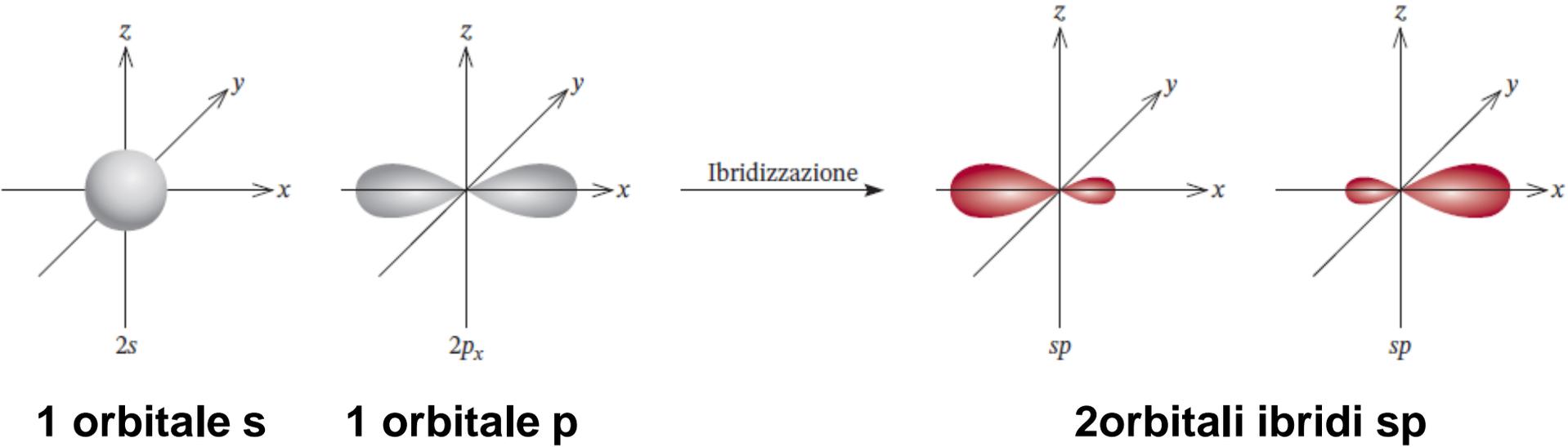
Ogni orbitali ibrido è composto da due lobi, come un orbitale p, che hanno segno opposto e diversa grandezza. Il lobo positivo è sempre più grande del negativo. Sono isoenergetici e di numero uguale rispetto agli orbitali di provenienza.

Ibridizzazione – mescolamento di due o più orbitali atomici a formare un nuovo set di orbitali ibridi.

1. Mescolare almeno 2 orbitali atomici non equivalenti (es. s e p). Gli orbitali ibridi hanno delle forme molto diverse dagli orbitali atomici originari.
2. Il numero degli orbitali ibridi è uguale al numero degli orbitali atomici utilizzati nel processo di ibridizzazione.
3. I legami covalenti sono formati dalla:
 - a. sovrapposizione di orbitali ibridi con orbitali atomici
 - b. sovrapposizione di orbitali ibridi con altri orbitali ibridi

Gli orbitali ibridi

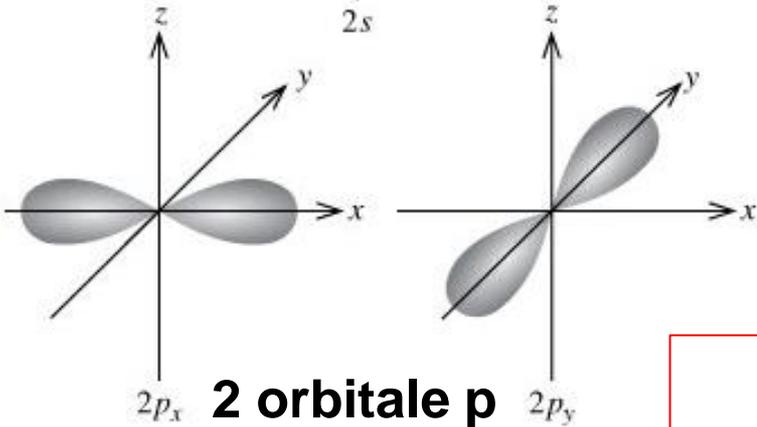
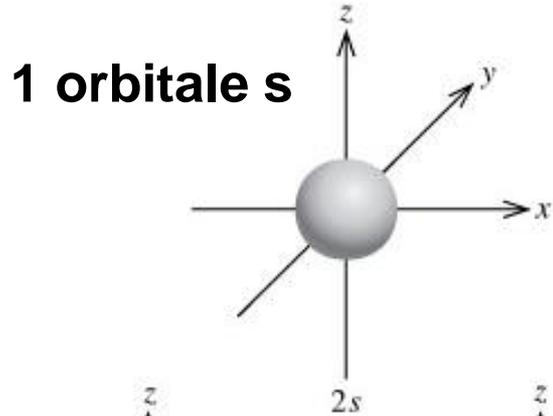
Ibridazione sp



Molecola lineare

Gli orbitali ibridi

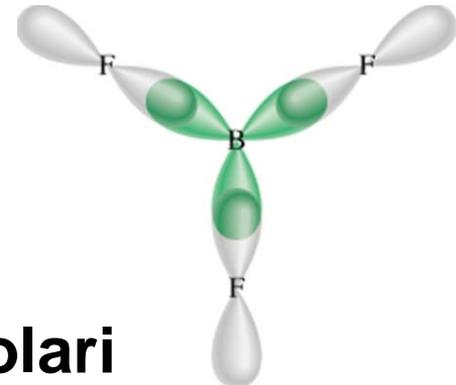
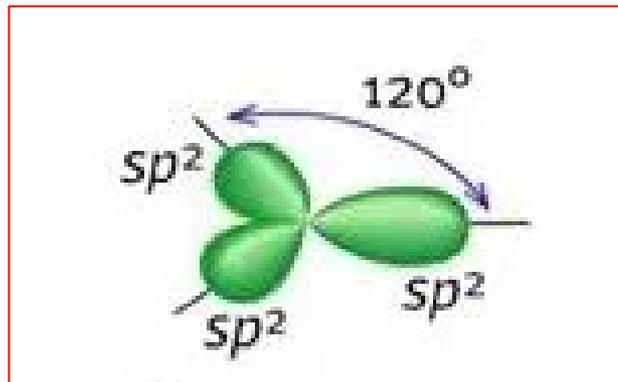
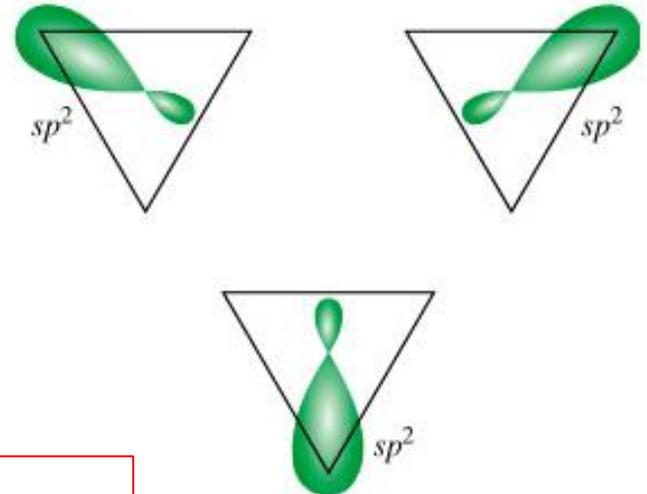
Ibridazione sp^2



Ibridizzazioni



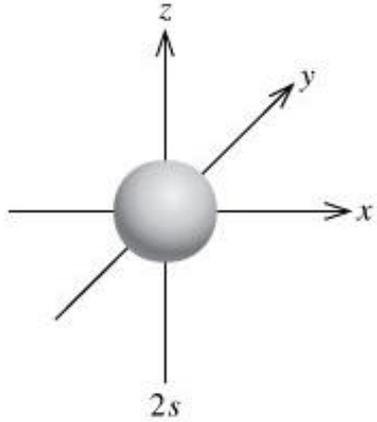
3 orbitali ibridi sp^2



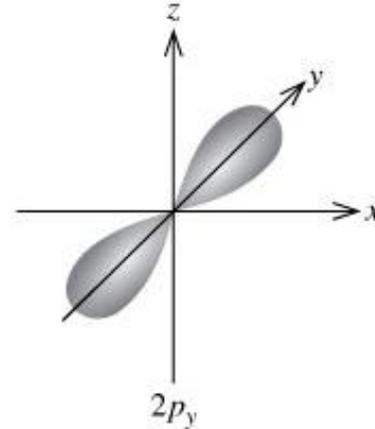
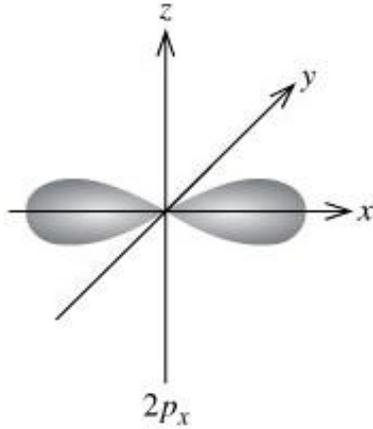
Molecole planari trigonali o angolari

Gli orbitali ibridi

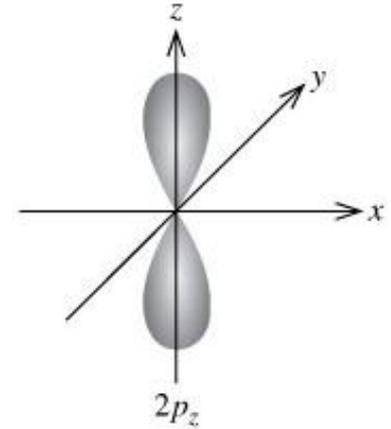
Ibridazione sp^3



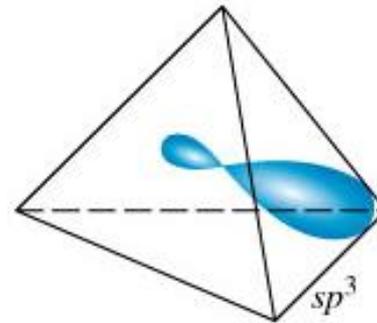
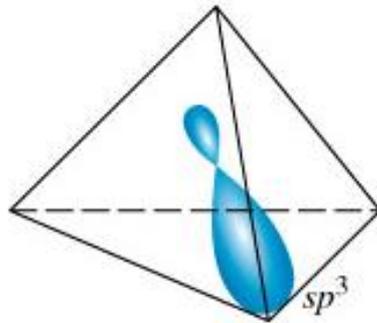
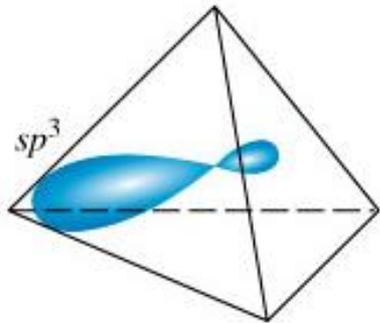
1 orbitale s



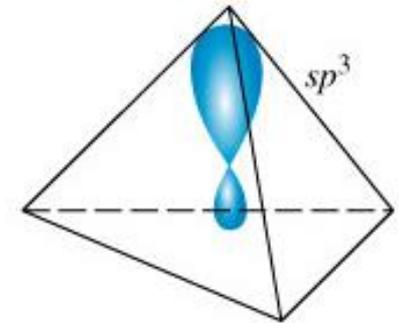
3 orbitale p



4 orbitali ibridi sp^3



Angoli di 109°



Molecole tetraedriche

Come posso determinare l'ibridizzazione dell'atomo centrale?

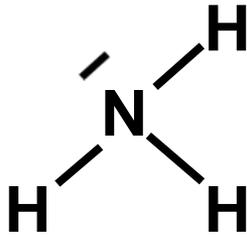
1. Scrivi la struttura di Lewis della molecola.
2. Conta il numero di coppie solitarie e il numero di atomi legati all'atomo centrale



ns	# di Coppie Solitarie (ds)	+	<u># di Atomi Legati (nc)</u>	<u>Ibridazione</u>	<u>Geometria</u>
		2			sp
	3			sp ²	Planari angolari
	4			sp ³	Tetraedriche
	5			sp ³ d	Bipiramidale trigonale
	6			sp ³ d ²	Ottaedro

Gli orbitali ibridi

NH_3



$ds = 1$

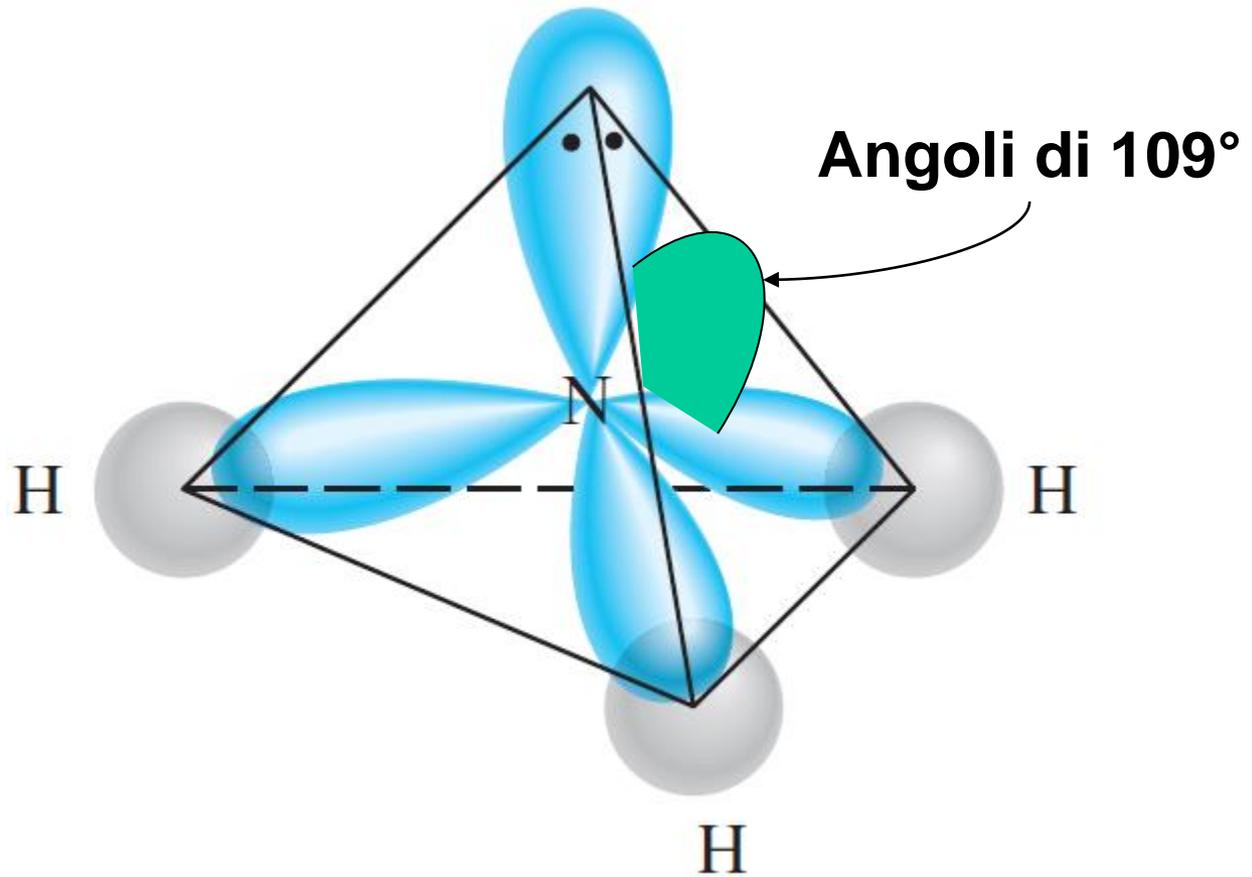
$nc = 3$

$ns = 4$



Ibridazione

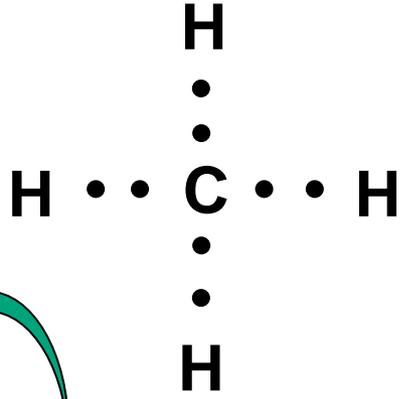
sp^3



Tetraedrica

Formazione di legami covalenti

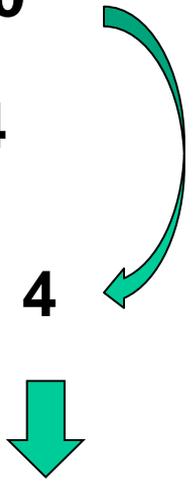
CH_4



$ds=0$

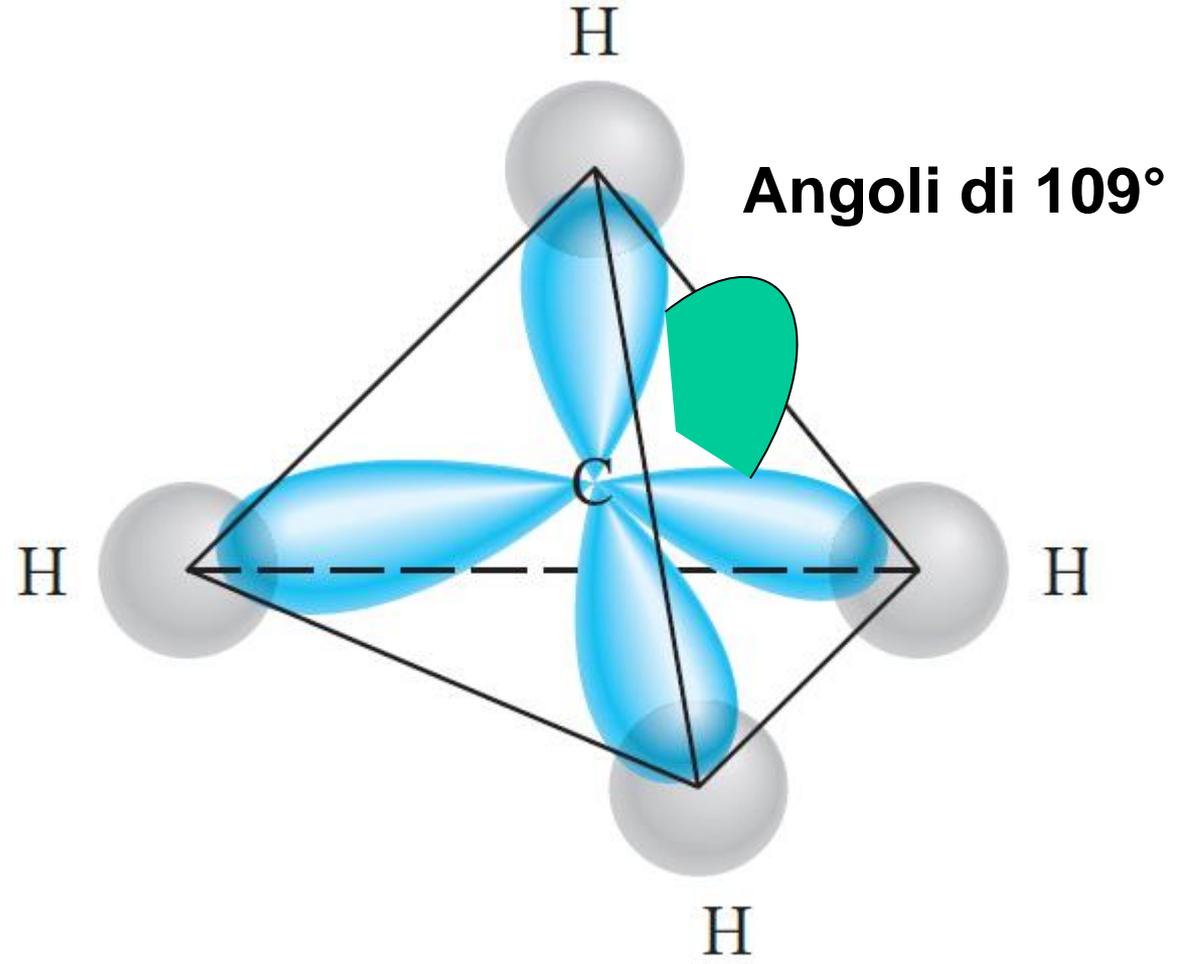
$nc=4$

$ns=4$



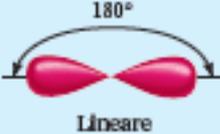
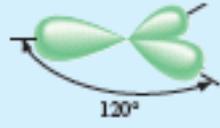
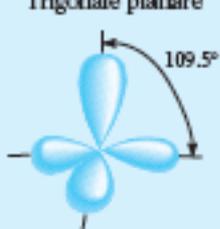
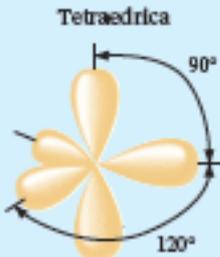
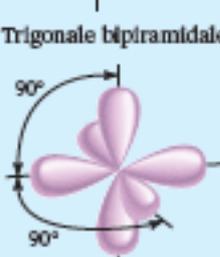
Ibridazione

sp^3



Tetraedrica

Tabella 7.4 Orbitali ibridi principali e loro forme

Orbitali atomici puri dell'atomo centrale	Ibridizzazione dell'atomo centrale	Numero di orbitali ibridi	Forma degli orbitali ibridi	Esempi
s, p	sp	2	 <p>Lineare</p>	BeCl_2
s, p, p	sp^2	3	 <p>Trigonale planare</p>	BF_3
s, p, p, p	sp^3	4	 <p>Tetraedrica</p>	$\text{CH}_4, \text{NH}_4^+$
s, p, p, p, d	sp^3d	5	 <p>Trigonale bipyramidale</p>	PCl_5
s, p, p, p, d, d	sp^3d^2	6	 <p>Ottaedrica</p>	SF_6

Gli orbitali ibridi non sono altro che gli orbitali su cui si trovano i doppietti sterici (numero sterico, responsabile della forma spaziale della molecola).

Si possono utilizzare le informazioni ottenute dal metodo Lewis-VSEPR per ricavare il tipo di orbitale ibrido che l'atomo centrale usa per formare la molecola.