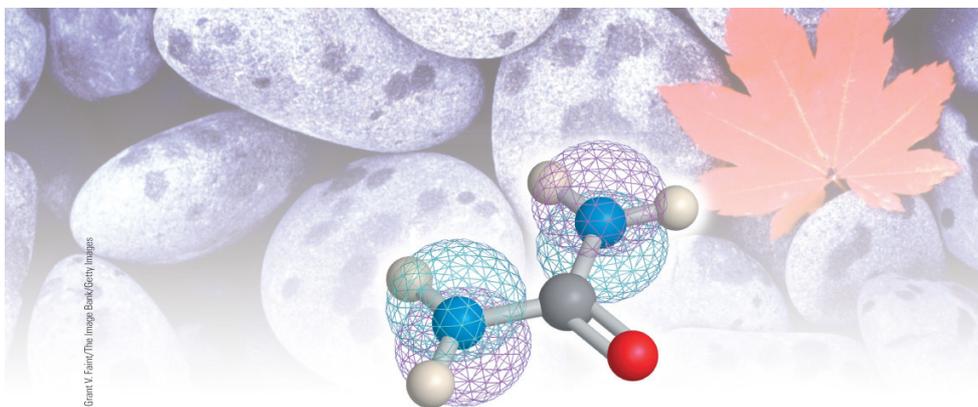


Struttura e legame chimico



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.



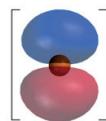
Orbitale s



Orbitale p

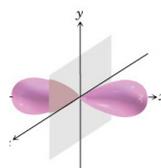
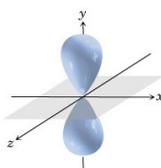
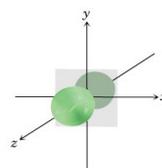


Orbitale d



Orbitale 2p

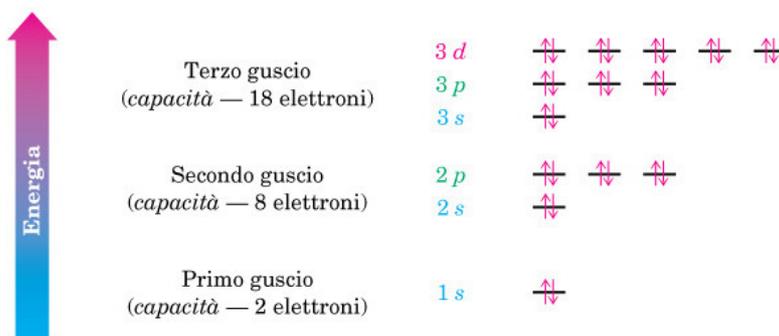
Forma degli orbitali 2p. Ciascuno dei tre orbitali a forma di manubrio ha un nodo tra i due lobi.

Orbitale 2p_xOrbitale 2p_yOrbitale 2p_z

Orbitali 2p

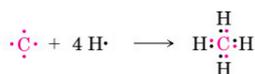
Proprietà atomiche

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

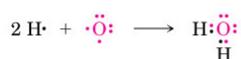
Il legame covalente



Metano (CH₄)



Ammoniaca (NH₃)



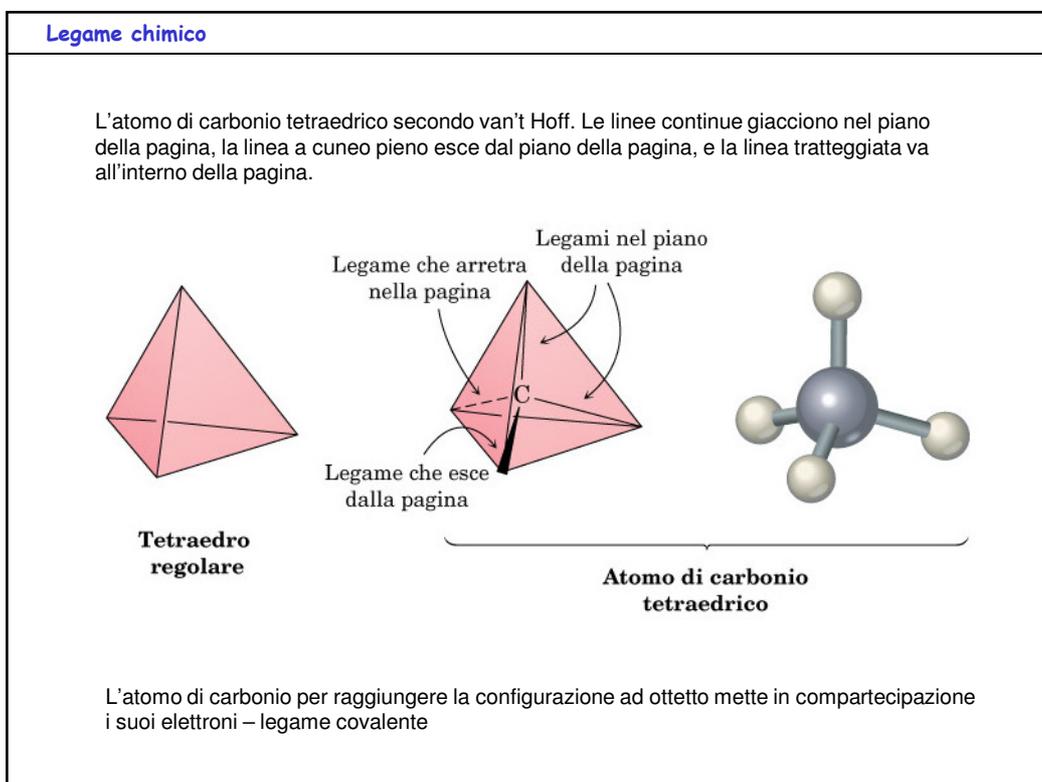
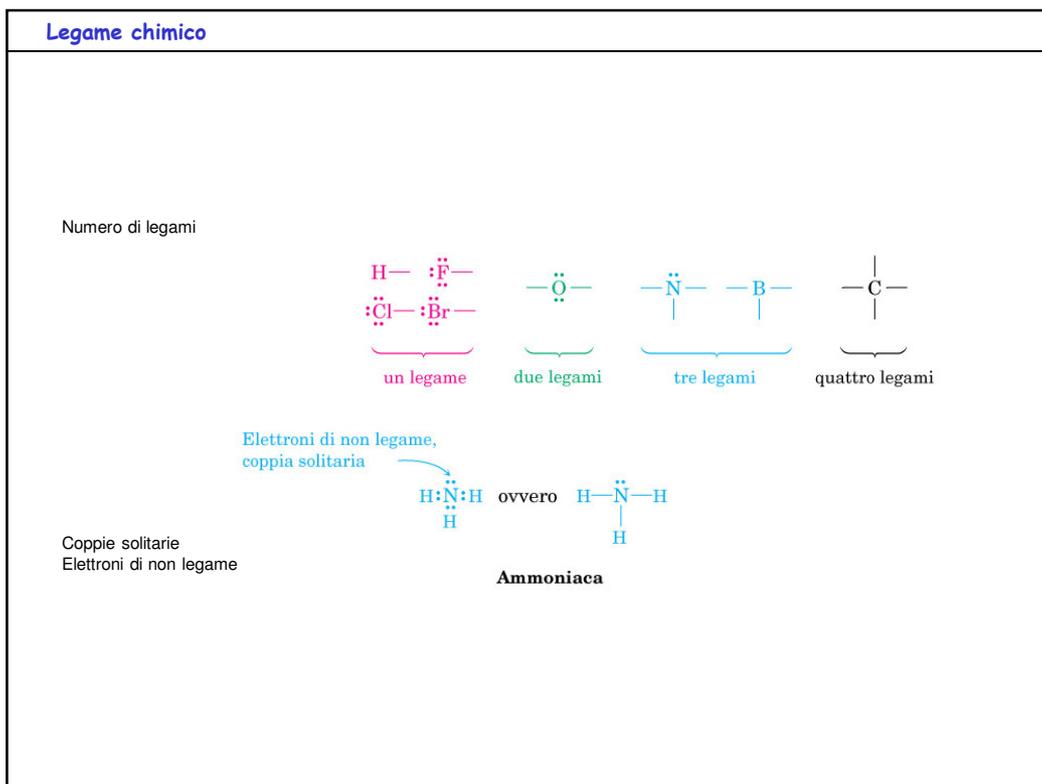
Acqua (H₂O)

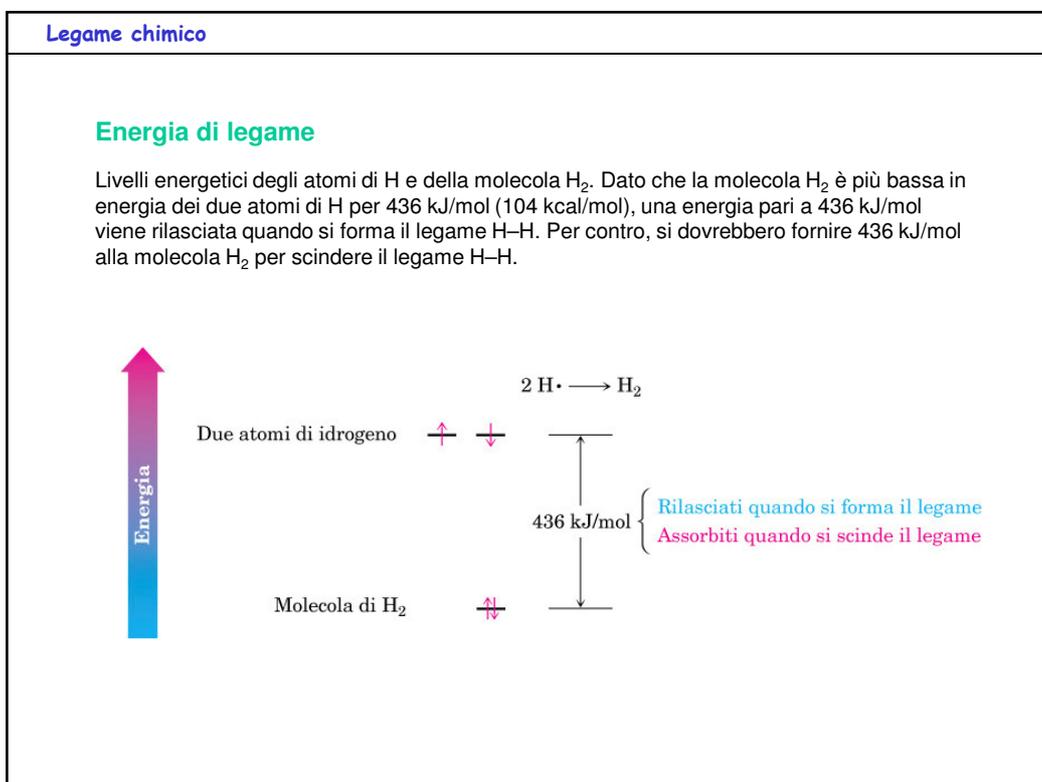
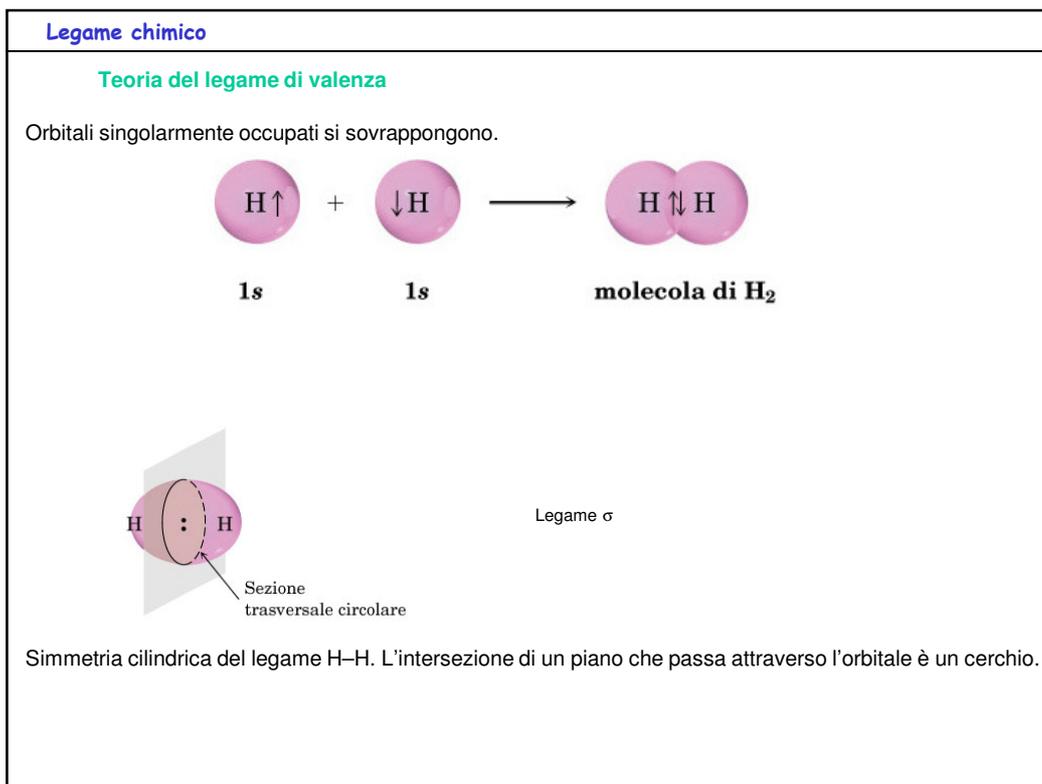


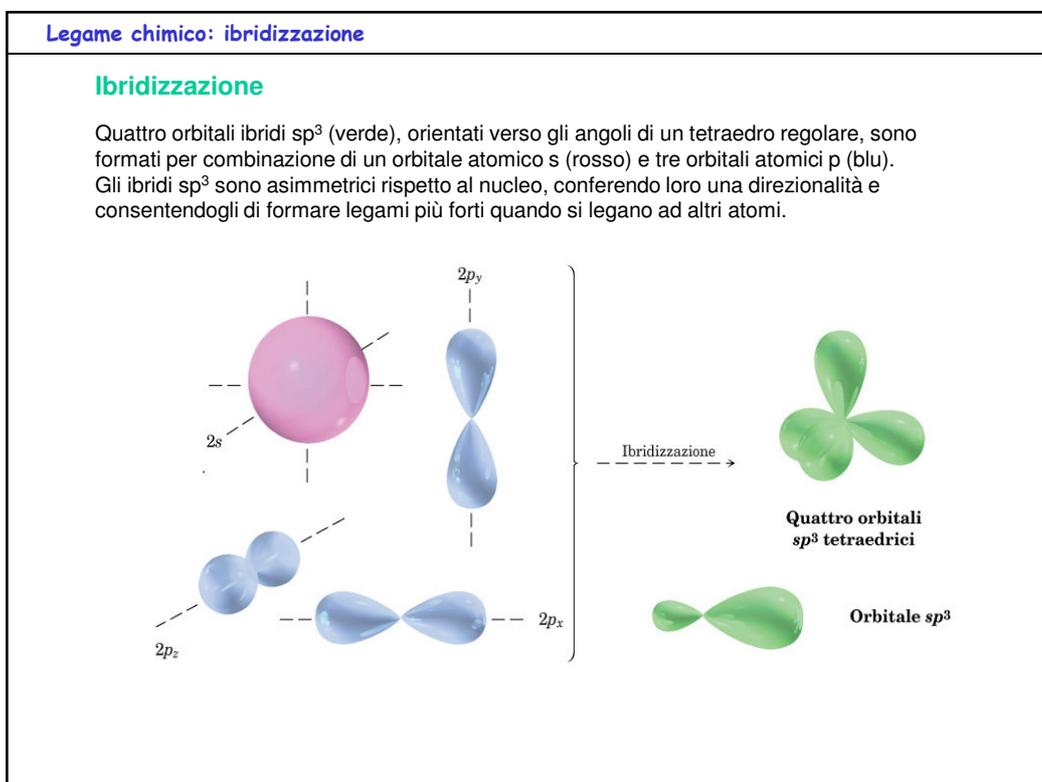
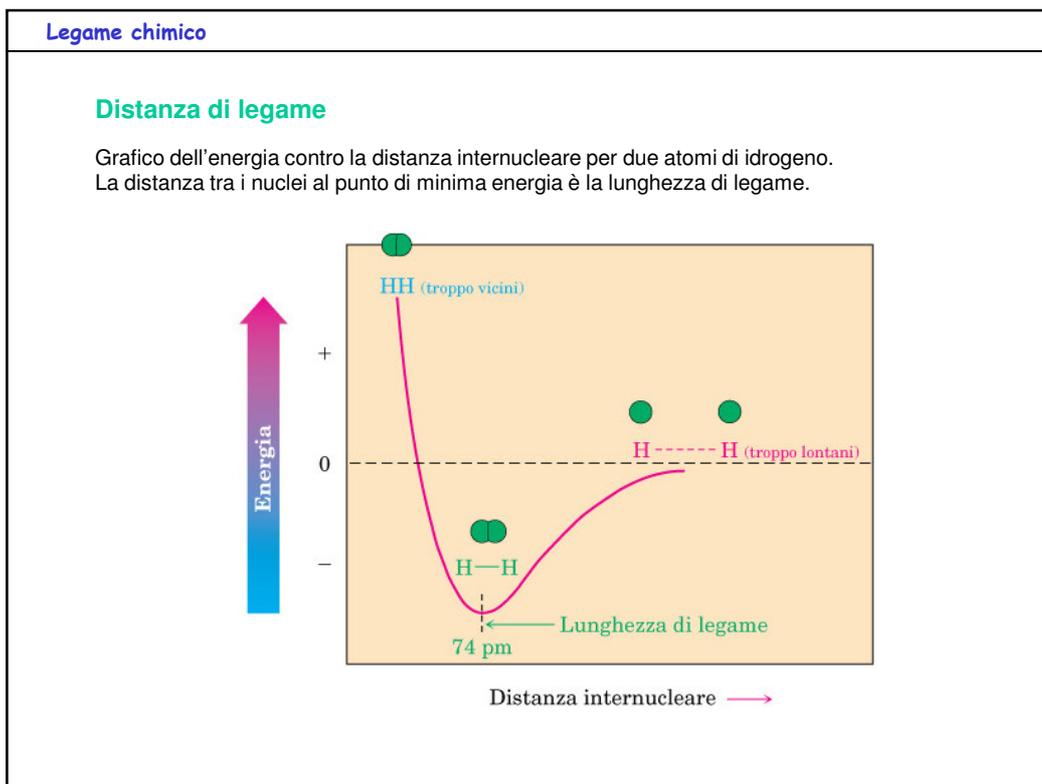
Metanolo (CH₃OH)

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 ₂ O)	$\text{H}:\ddot{\text{O}}:\text{H}$	$\text{H}-\text{O}-\text{H}$	Metano (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 (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 (CH ₃ OH)	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}:\text{C}:\ddot{\text{O}}:\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$	$\begin{array}{c} \text{H} \\ \\ \text{H}-\text{C}-\text{O}-\text{H} \\ \\ \text{H} \end{array}$



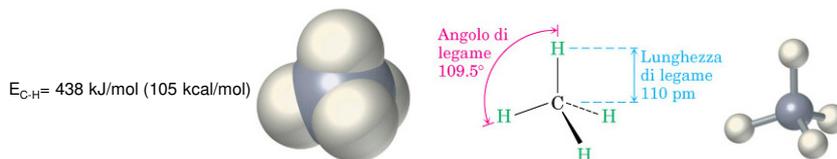




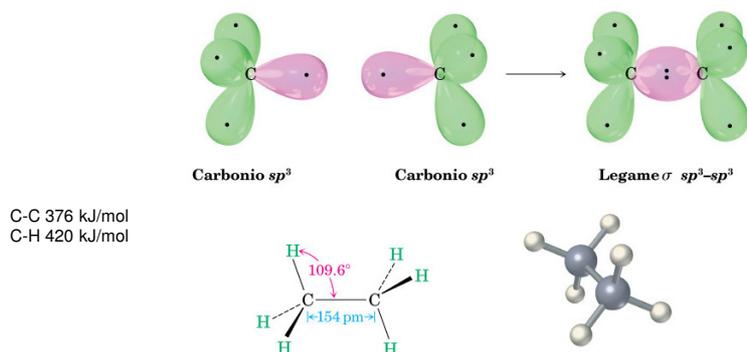
Legame chimico: ibridizzazione

Esempi di molecole con ibridazione sp^3

Struttura del metano che mostra gli angoli di legame di 109.5° .



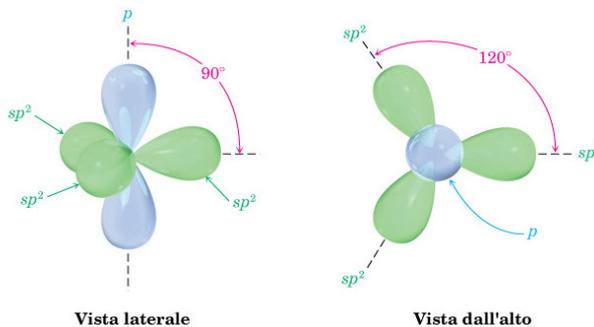
Struttura dell'etano. Il legame carbonio-carbonio viene formato per sovrapposizione s di due orbitali ibridi sp^3 . (Per chiarezza, i lobi più piccoli degli orbitali ibridi sp^3 non vengono mostrati).



Legame chimico: ibridizzazione

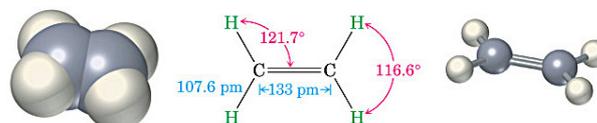
Un carbonio ibridizzato sp^2 .

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



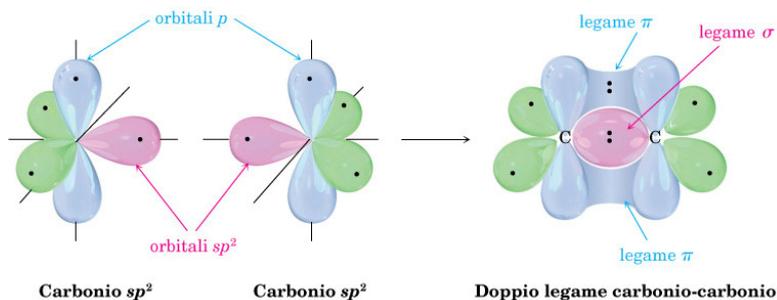
Struttura dell'etilene

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



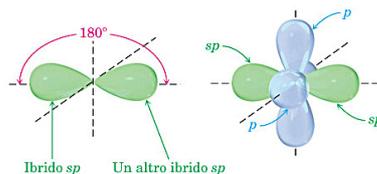
Legame chimico: ibridizzazione

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 σ (testa-testa) degli orbitali sp^2 (rosso), e l'altra parte deriva dalla sovrapposizione π (laterale) degli orbitali p non ibridizzati (blu). Il legame π ha regioni di densità elettronica su ciascun lato di una linea tracciata tra i nuclei.

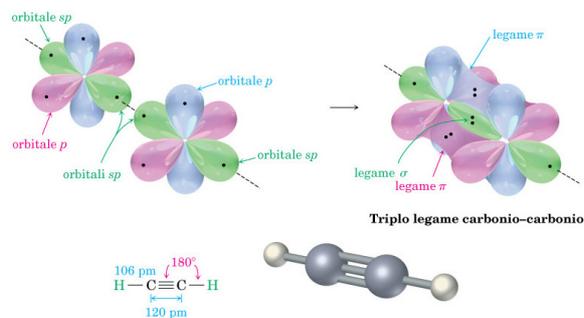


Legame chimico: ibridizzazione

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

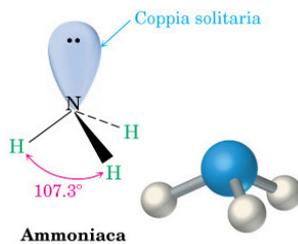


Struttura dell'acetilene. I due atomi di carbonio ibridizzati sp sono uniti da un legame σ $sp-sp$ e da due legami π $p-p$.

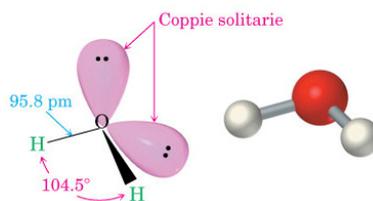


Legame chimico: ibridizzazione

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

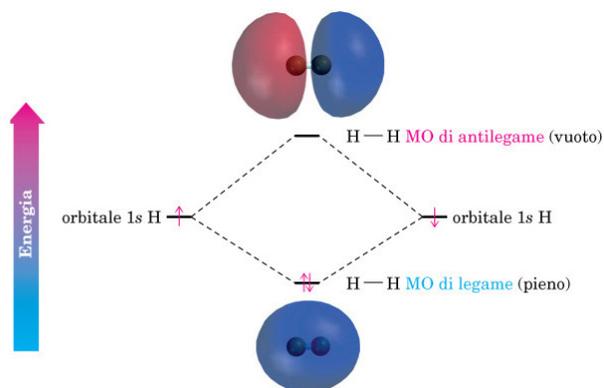


Struttura dell'acqua. L'atomo di ossigeno è ibridizzato sp^3 e possiede due coppie elettroniche solitarie. L'angolo di legame H-O-H è di 104.5° .



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 π C=C nell'etilene. Il MO π di legame deriva dalla combinazione addittiva degli orbitali atomici ed è occupato. Il MO π di antilegame deriva dalla combinazione sottrattiva degli orbitali atomici ed è vuoto.

